



ГОСУДАРСТВЕННЫЙ НАУЧНЫЙ ЦЕНТР РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
ИНСТИТУТ ФИЗИКИ ВЫСОКИХ ЭНЕРГИЙ

В.В.Киселев

Квантовая механика

Курс лекций. Часть II

Протвино 2006

—

УДК 530.145

М-24

ББК В314

ISBN

Киселев В.В. Квантовая механика. Курс лекций. Часть II. (Учебное пособие). — Протвино, 2006. — 191 с., библиогр.: 19.

Во второй части годового курса лекций по квантовой механике изложена теория возмущений, процедура сложения моментов, релятивистская квантовая механика свободных скалярных, спинорных и векторных частиц на основе группы Пуанкаре и метода вторичного квантования, нерелятивистский переход для спинора Дирака и релятивистские поправки в атоме водорода, качественная теория сложных атомов, некоторые вопросы феноменологии атомов во внешних полях, теория квантового излучения в дипольном приближении, рассеяние в подходе S -матрицы и метод фазовых сдвигов.

Пособие рассчитано на студентов младших курсов физических специальностей университетов.

Рецензент —

© Киселев В.В., 2006

© Государственный научный центр
Российской Федерации
Институт физики высоких энергий, 2006

Оглавление

Предисловие	5
Часть II	7
Тема 1. Теория возмущений	9
Лекция № 1	9
1.1. Стационарная теория	9
1.2. Нестационарная теория	15
Тема 2. Сложение моментов	29
Лекция № 2	29
2.1. Сложение двух моментов: базис состояний	30
2.2. Тензорные операторы: правила отбора	34
Тема 3. Релятивистская квантовая механика	39
Лекция № 3	39
3.1. Вращения	39
3.2. Бусты	42
3.3. Собственная ортохронная группа Лоренца	44
3.4. Дискретные преобразования	46
3.5. Классификация состояний: представления	48
Лекция № 4	54
4.1. Группа Пуанкаре	54
4.2. Ковариантный вид коммутаторов и дискретные симметрии	58
4.3. Скалярное поле	60
Лекция № 5	71
5.1. Вейлевские спиноры	71
5.2. Дираковские спиноры	76
5.3. Майорановские спиноры	87
Лекция № 6	88
6.1. Безмассовое векторное поле	88
6.2. Калибровочное взаимодействие	93
6.3. «Релятивистский» атом водорода: спектр	97

ТЕМА 4. НЕРЕЛЯТИВИСТСКОЕ ПРИБЛИЖЕНИЕ: ЭФФЕКТИВНАЯ ТЕОРИЯ	103
Лекция № 7	103
7.1. Построение эффективного действия	103
7.2. Интерпретация поправок	107
7.3. Атом водорода: поправки	109
7.4. Аномальный магнитный момент	112
ТЕМА 5. АТОМ ГЕЛИЯ	117
Лекция № 8	117
8.1. Нерелятивистская задача	117
8.2. Обменное взаимодействие	119
8.3. Уравнения Хартри–Фока	121
8.4. Самосогласованное поле: конфигурация электронов, термы	124
8.5. Основное состояние	125
8.6. Релятивистские поправки: электронные термы _{<i>l</i>}	129
ТЕМА 6. СЛОЖНЫЙ АТОМ	131
Лекция № 9	131
9.1. Определитель Слетера	131
9.2. Поправки к центральному потенциалу: термы	132
9.3. Релятивистские поправки	134
ТЕМА 7. ФЕНОМЕНОЛОГИЯ: АТОМ ВО ВНЕШНЕМ ПОЛЕ	139
Лекция № 10	139
10.1. Атом в магнитном поле: энергия взаимодействия электронов	139
10.2. Аномальный эффект Зеемана	141
10.3. Диамагнетизм	142
10.4. Парамагнетизм Ван-Флека	143
10.5. Эффект Пашена–Бака	143
ТЕМА 8. СПОНТАННОЕ ИЗЛУЧЕНИЕ	145
Лекция № 11	145
11.1. Дипольное приближение	145
11.2. Дипольные переходы в атомах: правила отбора	150
11.3. Индуцированное излучение и поглощение когерентного поля	152
ТЕМА 9. РАССЕЯНИЕ	155
Лекция № 12	155
12.1. Асимптотические состояния и \mathcal{S} -матрица	155
12.2. Функция Грина	157
12.3. Функция Грина свободной частицы	160
12.4. Интегральное уравнение	161
12.5. Асимптотическое поведение и формула для сечения	163
12.6. \mathcal{T} -матрица, унитарность и оптическая теорема	165
12.7. Борновское приближение	168

Лекция № 13	170
13.1. Сферические волны свободной частицы	171
13.2. Разложение волны де Бройля по парциальным волнам	173
13.3. Фазовые сдвиги и парциальные сечения	176
13.4. Свойства фазовых сдвигов	177
13.5. Рассеяние тождественных частиц	183
13.6. О кулоновском потенциале, резонансах и неупругих столкновениях . .	184
ПОСЛЕСЛОВИЕ	189
ЛИТЕРАТУРА	191

Предисловие

Материал данного учебного пособия представляет собой расширенный вариант лекций, предлагаемых студентам четвертого курса Московского физико-технического института (Государственного университета) в осеннем семестре в качестве второй части годового курса квантовой механики на кафедре теоретической физики, и является логическим продолжением первой части лекций того же автора.

Наряду со стандартным представлением теории возмущений, сложения моментов, качественного описания сложных атомов, взаимодействия атомов с магнитным полем, квантового излучения в дипольном приближении и теории упругого рассеяния, в эти лекции включен существенно расширенный материал по релятивистской квантовой механике свободных частиц с последующим нерелятивистским переходом, а также \mathcal{S} -матричный подход в теории рассеяния.

Автор сознательно пошел на такое «усложнение», потому что широко распространенное эвристическое построение уравнения Дирака путем «линеаризации» уравнения Кляйна–Гордона–Фока для скалярной частицы, на мой взгляд, уже превратилось в рудимент, представляющий интерес скорее в плане предметного изучения истории физики, а главное, оно порождает искаженное представление об истинном состоянии квантовой теории, развитие которой концептуально давно ушло вперед по сравнению с простыми, но фантастически точными шагами Дирака на заре квантовой эры. На смену отживших свое время конструкций типа «моря Дирака» и *zitterbewegung* (циттербеуегунг – дрожание) электрона встали четкие и логически строгие представления, основанные на группе Пуанкаре и квантованном локальном поле. Уравнение Дирака не угадывается, а последовательно выводится из этих квантово-релятивистских предпосылок. Та же программа реализуется и для безмассового векторного поля, для которого, как следует из релятивизма, с необходимостью имеют место калибровочные преобразования (автор подсмотрел этот ход у Стивена Вайнберга в его трехтомнике “Квантовая теория поля”). Предмет квантованных свободных полей так обширен, что, несмотря на явно увеличенный объем 4-х лекций по релятивизму, в них не вошли многие важные вопросы, такие, как, например, малая группа Вигнера.

Нерелятивистскому переходу придано современное звучание в свете построения эффективного действия: от релятивистских лагранжианов к ряду в терминах нерелятивистских полей, в котором выделен ведущий вклад и малые возмущения. Здесь опущено из рассмотрения преобразование Фолди-Ваутхойзена со всей его арифметической механикой разделения больших и малых компонент, а упор сделан на физическом содержании нерелятивистского перехода.

При изложении рассеяния автор посчитал нужным расширить раздел, посвященный функциям Грина, настолько, чтобы стали возможными введение ключевых понятий асимптотических состояний и \mathcal{S} -матрицы, а также последовательный вывод оптической теоремы из унитарности, наряду со стандартным анализом связи полных сечений с мнимой частью амплитуды рассеяния вперед при рассмотрении суммы парциальных сечений.

В силе остаются сделанные в предисловии к первой части курса замечания о взаимодополняющей роли лекций и практических занятий по решению задач.

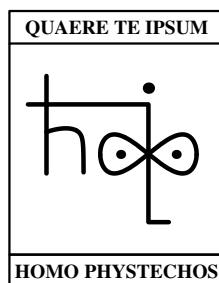
Автор благодарен профессору Ю.М.Белоусову за постоянную поддержку и разъяснения. Я признателен профессорам С.П.Аллилуеву, Г.С.Ирошникову и доцентам О.И.Толстихину, Л.П.Суханову, С.Н.Вергелесу, С.А.Гордюнину и В.П.Кузнецову за помощь при обсуждении решений задач и за интересные беседы, а также академику С.С.Герштейну за поддержку и Н.Н.Пастушковой за теплую атмосферу на кафедре.

Квантовая механика

Часть II

*“Кто хочет знания, пусть ищет его там,
где оно находится...”*

Мишель де Монтень



—

—

Тема 1

Теория возмущений

Лекция № 1

Стационарная задача и разложение по базису стационарных состояний исходного гамильтониана, ряд по малой константе связи возмущения, рекуррентные формулы для поправок к энергии и к состояниям, критерий применимости теории возмущений, невырожденный случай и правильные волновые функции ведущего приближения, секулярное уравнение, точное решение задачи с двумя уровнями: отсутствие перекрытия уровней, задача теории возмущений в нестационарном случае, представление взаимодействия, ведущее приближение, постоянное возмущение и соотношение неопределенностей время–энергия, периодическое возмущение, резонансный вклад при бесконечно длительном воздействии возмущения, сохранение энергии, индуцированное излучение и поглощение, “золотое правило Ферми” для плотности вероятности перехода в непрерывный спектр, мгновенное включение возмущения и “замороженное состояние”, критерий мгновенности, адиабатическое изменение со временем параметров гамильтониана, адиабатическое приближение для исходного состояния, критерий адиабатичности, фаза Берри для циклического изменения параметров гамильтониана, ковариантная производная как генератор трансляций правильного адиабатического состояния, калибровочная инвариантность в пространстве параметров, теорема о телесном угле, задача о спине во вращающемся магнитном поле.

Точно решаемые квантовомеханические задачи скорее исключение, чем правило. Поэтому на практике часто приходится использовать приближенные методы нахождения состояний и их квантовых чисел. Стандартный подход в этом смысле — теория возмущений для стационарного и нестационарного уравнений Шредингера.

1.1. Стационарная теория

1.1.1. Невырожденный случай

Пусть известны точные решения стационарного уравнения с гамильтонианом \hat{H}_0 ,

$$\hat{H}_0 |n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)} |n^{(0)}\rangle, \quad (1.1)$$

где $|n^{(0)}\rangle$ — невырожденные состояния дискретного спектра с энергией $E_n^{(0)}$. Рассмотрим спектральную задачу с гамильтонианом

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \lambda V, \quad \lambda \rightarrow 0, \quad (1.2)$$

где возмущение V не зависит от времени, так же как и исходный гамильтониан \hat{H}_0 . В силу предельного перехода $\lambda \rightarrow 0$ будем полагать, что *базис гильбертова пространства $|n^{(0)}\rangle$ полон и в гильбертовом пространстве в задаче с возмущением*. Это предположение является центральным в теории возмущений! Если оно *a posteriori* оказывается неверным, то теория возмущений теряет всякий смысл.

Далее нас будет интересовать только дискретный спектр в задаче с возмущением, так как в силу центрального предположения метода области непрерывного спектра в задаче с возмущением и без него совпадают, в то время как дискретные уровни энергии могут смещаться при введении возмущения. Будем искать собственные значения

$$\hat{H} |n\rangle = E_n |n\rangle \quad (1.3)$$

в виде ряда по $\lambda \rightarrow 0$:

$$E_n = E_n^{(0)} + \sum_{p=1}^{\infty} \lambda^p \epsilon_p, \quad (1.4)$$

где ϵ_p — поправка p -того порядка. Собственные векторы состояний также можно записать в виде ряда

$$|n\rangle = |n^{(0)}\rangle + \sum_{p=1}^{\infty} \lambda^p |n^{(p)}\rangle. \quad (1.5)$$

Однако, собственные состояния гамильтониана допускают несингулярное преобразование

$$|n\rangle \mapsto f(\lambda) |n\rangle.$$

Поэтому, для того чтобы разложение состояния в ряд по λ было однозначным, необходимо зафиксировать амплитуду вероятности одного из базисных векторов исходного гильбертова пространства, например, $|n^{(0)}\rangle$, что представляется вполне естественным. Пусть

$$\langle n^{(0)} | n \rangle = 1. \quad (1.6)$$

Подставляя сюда разложение состояния $|n\rangle$ в виде ряда по степеням λ и рассматривая его последовательно в каждом порядке, находим, что

$$\langle n^{(0)} | n^{(p)} \rangle = 0, \quad (1.7)$$

т.е. каждая поправка к состоянию не содержит вклада $|n^{(0)}\rangle$ и, следовательно ортогональна исходному невозмущенному состоянию. Конечно, выбор условия однозначности в форме (1.6) приводит к собственному вектору, норма которого, вообще говоря, отлична от единицы, но эта проблема легко решается последовательно в любом заданном наперед порядке по λ .

Подставляя представление состояний и энергии в виде рядов, находим

$$(\hat{H}_0 + \lambda V) \left\{ |n^{(0)}\rangle + \sum_{p=1}^{\infty} \lambda^p |n^{(p)}\rangle \right\} = \left(E_n^{(0)} + \sum_{p=1}^{\infty} \lambda^p \epsilon_p \right) \left\{ |n^{(0)}\rangle + \sum_{p=1}^{\infty} \lambda^p |n^{(p)}\rangle \right\}, \quad (1.8)$$

так что последовательно в каждом порядке по λ получаем рекуррентную систему уравнений:

$$\begin{aligned} \lambda^0 : \quad & \hat{H}_0 |n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)} |n^{(0)}\rangle, \\ \lambda^1 : \quad & \hat{H}_0 |n^{(1)}\rangle + V |n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)} |n^{(1)}\rangle + \epsilon_1 |n^{(0)}\rangle, \\ \lambda^p : \quad & \hat{H}_0 |n^{(p)}\rangle + V |n^{(p-1)}\rangle = E_n^{(0)} |n^{(p)}\rangle + \epsilon_1 |n^{(p-1)}\rangle + \dots + \epsilon_p |n^{(0)}\rangle. \end{aligned} \quad (1.9)$$

Пользуясь ортогональностью поправок и состояния $|n^{(0)}\rangle$ и исходным уравнением $\langle n^{(0)} | \hat{H}_0 = \langle n^{(0)} | E_n^{(0)}$, возьмем проекцию уравнений (1.9) на это состояние: $\langle n^{(0)} | \bullet \rangle$, так что

$$\begin{aligned}\epsilon_1 &= \langle n^{(0)} | V | n^{(0)} \rangle = V_{nn}, \\ \epsilon_2 &= \langle n^{(0)} | V | n^{(1)} \rangle, \\ \epsilon_p &= \langle n^{(0)} | V | n^{(p)} \rangle,\end{aligned}\tag{1.10}$$

т.е. опять-таки рекуррентную схему вычисления поправок к энергии, если известны поправки к состоянию.

Поправки к состоянию в силу их ортогональности к уровню $|n^{(0)}\rangle$ в базисе исходной задачи раскладываются в виде

$$|n^{(p)}\rangle = \sum_{k \neq n} |k^{(0)}\rangle \langle k^{(0)} | n^{(p)} \rangle,\tag{1.11}$$

где амплитуды разложения легко найти, проектируя уравнения (1.9) на состояния базиса $\langle k^{(0)} | \bullet \rangle$:

$$\begin{aligned}\langle k^{(0)} | V | n^{(0)} \rangle &= (E_n^{(0)} - E_k^{(0)}) \langle k^{(0)} | n^{(1)} \rangle, \\ \langle k^{(0)} | V | n^{(p)} \rangle &= (E_n^{(0)} - E_k^{(0)}) \langle k^{(0)} | n^{(p)} \rangle + \epsilon_1 \langle k^{(0)} | n^{(p-1)} \rangle + \dots + \epsilon_{p-1} \langle k^{(0)} | n^{(1)} \rangle,\end{aligned}\tag{1.12}$$

или с учетом $\epsilon_0 = 0$

$$\langle k^{(0)} | n^{(p)} \rangle = \frac{1}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} \{V_{kn} - \epsilon_1 \langle k^{(0)} | n^{(p-1)} \rangle - \dots - \epsilon_{p-1} \langle k^{(0)} | n^{(1)} \rangle\},\tag{1.13}$$

где $p \geq 1$, $k \neq n$.

Для примера,

$$|n^{(1)}\rangle = \sum_{k \neq n} \frac{V_{kn}}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} |k^{(0)}\rangle,\tag{1.14}$$

откуда

$$\epsilon_2 = \sum_{k \neq n} \frac{V_{nk} V_{kn}}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}},$$

и в силу $V_{nk} = \langle n^{(0)} | V | k^{(0)} \rangle = \langle k^{(0)} | V | n^{(0)} \rangle^* = V_{kn}^*$,

$$\epsilon_2 = \sum_{k \neq n} \frac{|V_{kn}|^2}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}.\tag{1.15}$$

Отсюда, в частности, следует, что для основного состояния с наименьшей энергией $E_n^{(0)} - E_k^{(0)} < 0$ поправка второго порядка всегда отрицательна, если не равна нулю.

Подчеркнем еще раз, что ведущая поправка к энергии уровня задается средним значением возмущения. По смыслу теории возмущений поправки высших порядков становятся существенны, если поправки низшего порядка обращаются в нуль или необходимо получить значение с высокой точностью.

1.1.2. Условия применимости

Необходимым условием применимости теории возмущений является сходимость рядов для энергий и собственных состояний системы с $\hat{H} = \hat{H}_0 + \lambda V$. Мы установили, что поправки к состояниям строятся по степеням малого отношения матричного элемента возмущения к инкременту уровней в исходной системе

$$\frac{|V_{kn}|}{\Delta E_{kn}^{(0)}} \ll 1.$$

Значит, возмущение можно считать малым, если его характерная величина меньше типичного расстояния между уровнями энергии, т.е. если возмущение не приводит к “перекрытию уровней” исходной системы. В этом случае вклад высших поправок к состояниям подавлен степенями этого малого параметра, так что из выражения для поправок к энергии (1.10) следует, что и они также подавлены в зависимости от порядка теории возмущений.

1.1.3. Вырожденный случай

Если уровень исходной системы $E_n^{(0)}$ является вырожденным и кратность его вырождения равна k , то предел $\lambda \rightarrow 0$ в системе с возмущением также можно определить однозначно, фиксируя вклад базисных собственных векторов в k -мерном подпространстве с энергией $E_n^{(0)}$

$$\hat{H}_0 |n^{(0)}, a\rangle = E^{(0)} |n^{(0)}, a\rangle, \quad a \in (\overline{1, k}), \quad (1.16)$$

в состояние

$$|n\rangle = \sum_{a=1}^k C_a |n^{(0)}, a\rangle + \sum_{p=1}^{\infty} \lambda^p |n^{(p)}\rangle, \quad (1.17)$$

т.е. задав “вектор”

$$C_a = \langle n^{(0)}, a | n \rangle. \quad (1.18)$$

Отсюда опять следует, что поправки по построению ортогональны подпространству состояний с энергией $E_n^{(0)}$.

Используя разложение в ряд энергии и состояния, в полной аналогии с невырожденным случаем в первом порядке по λ находим

$$\hat{H}_0 |n^{(1)}\rangle + V \sum_{a=1}^k C_a |n^{(0)}, a\rangle = E_n^{(0)} |n^{(1)}\rangle + \epsilon_1 \sum_{a=1}^k C_a |n^{(0)}, a\rangle. \quad (1.19)$$

Проектируя это уравнение на $\langle n^{(0)}, b | \bullet \rangle$ с учетом уравнения на собственные значения гамильтониана \hat{H}_0 и ортогональности поправок ведущему вкладу за счет $|n^{(0)}, b\rangle$, получаем уравнение

$$\sum_{a=1}^k \{V_{ba} - \epsilon_1 \delta_{ba}\} C_a = 0, \quad V_{ba} = \langle n^{(0)}, b | V | n^{(0)}, a \rangle, \quad (1.20)$$

которое говорит о том, что вектор C_a является собственным для эрмитовой матрицы V_{ab} , и его собственное значение ϵ_1 дает величину ведущей поправки к энергии этого состояния.

Секулярное уравнение для матрицы $||\hat{V}||_{ba} = V_{ba}$ в подпространстве собственных состояний энергии $E_n^{(0)}$

$$\det(\hat{V} - \epsilon) = 0 \quad (1.21)$$

имеет k собственных значений, которые, вообще говоря, тоже могут быть вырождены. Выбирая значения C_a в виде собственных векторов матрицы \hat{V} , находим **“правильные” функции ведущего приближения**

$$|\tilde{n}^{(0)}, g\rangle, \quad \hat{V} |\tilde{n}^{(0)}, g\rangle = \epsilon_1^{(g)} |\tilde{n}^{(0)}, g\rangle, \quad (1.22)$$

где g нумерует собственные значения матрицы \hat{V} . Поскольку правильные функции составляют ортогональный базис, задача нахождения высших поправок теперь сводится к решению тех же рекуррентных соотношений, что и в невырожденном случае, для каждого из собственных векторов матрицы \hat{V} :

$$\hat{H}_0 |n^{(p)}, g\rangle + V |n^{(p-1)}, g\rangle = E_n^{(0)} |n^{(p)}, g\rangle + \epsilon_1^{(g)} |n^{(p-1)}, g\rangle + \dots + \epsilon_p^{(g)} |n^{(0)}, g\rangle. \quad (1.23)$$

Дальнейшее построение повторяет рассмотрение невырожденного случая.

1.1.4. Задача с двумя уровнями

Если спектр квантовой системы заведомо включает в себя только два уровня, то задачу для гамильтониана $\hat{H}_0 + \lambda V$ можно решить точно. В самом деле, в этом случае решение представляется в виде разложения

$$|\psi\rangle = c_1 |1\rangle + c_2 |2\rangle \quad (1.24)$$

по базисным состояниям исходной системы

$$\hat{H}_0 |1\rangle = E_1^{(0)} |1\rangle, \quad \hat{H}_0 |2\rangle = E_2^{(0)} |2\rangle. \quad (1.25)$$

Тогда проекция уравнения на собственные значения

$$\hat{H} |\psi\rangle = E |\psi\rangle \quad (1.26)$$

на базисные вектора дает

$$\begin{aligned} H_{11} c_1 + \lambda V_{12} c_2 &= E c_1, \\ H_{22} c_2 + \lambda V_{21} c_1 &= E c_2, \end{aligned} \quad (1.27)$$

или в матричном виде

$$\begin{pmatrix} H_{11} & \lambda V_{12} \\ \lambda V_{12}^* & H_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}, \quad (1.28)$$

т.е. уравнение на собственные значения матрицы 2×2 . В стандартной процедуре

$$\det\{\hat{H} - E\} = \left[\frac{1}{2}(H_{11} + H_{22}) - E \right]^2 - \frac{1}{4}(H_{11} - H_{22})^2 - \lambda^2 |V_{12}|^2 = 0.$$

Решения этого уравнения

$$E_{\pm} = \frac{1}{2}(H_{11} + H_{22}) \pm \sqrt{\frac{1}{2}(H_{11} - H_{22})^2 + \lambda^2|V_{12}|^2} \quad (1.29)$$

суть искомые значения энергии стационарных состояний, а соответствующие состояния в исходном базисе удобно выразить в виде унитарного поворота

$$|\psi_+\rangle = e^{i\phi/2} \sin \frac{\alpha}{2} |1\rangle + e^{-i\phi/2} \cos \frac{\alpha}{2} |2\rangle, \quad |\psi_-\rangle = e^{i\phi/2} \cos \frac{\alpha}{2} |1\rangle - e^{-i\phi/2} \sin \frac{\alpha}{2} |2\rangle, \quad (1.30)$$

где мы ввели фазу матричного элемента $V_{12} = |V_{12}|e^{i\phi}$, и

$$\tan \frac{\alpha}{2} = -\frac{\lambda|V_{12}|}{\frac{1}{2}(H_{11} - H_{22}) - \sqrt{\frac{1}{2}(H_{11} - H_{22})^2 + \lambda^2|V_{12}|^2}},$$

откуда

$$\tan \alpha = -\frac{2\lambda|V_{12}|}{H_{11} - H_{22}}. \quad (1.31)$$

Здесь, конечно,

$$H_{11} = E_1^{(0)} + \lambda V_{11}, \quad H_{22} = E_2^{(0)} + \lambda V_{22}.$$

Зафиксируем значения матричных элементов: $E_{1,2}^{(0)}$, V_{ab} , — и построим зависимость от λ для диагональных элементов гамильтониана и его собственных значений, как это проиллюстрировано на рис. 1.1 в случае $V_{11} > 0$, $V_{22} < 0$.

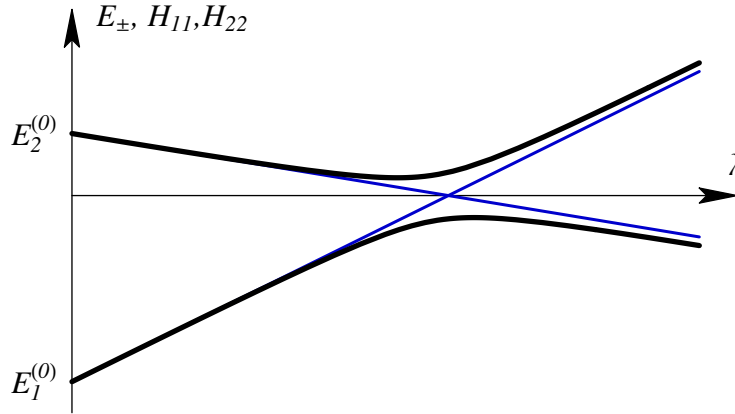


Рис. 1.1: Зависимость собственных значений гамильтониана E_{\pm} (жирные линии) и диагональных элементов H_{11} , H_{22} (тонкие линии) от константы связи возмущения λ .

Как видим, возмущение может быть настолько сильным, что в ведущем приближении диагональные матричные элементы имеют точку пересечения. Однако, точное решение показывает, что истинные значения собственных значений гамильтониана не пересекаются. Поскольку допустимая область изменения угла $\alpha \in [0, \pi]$, собственные состояния гамильтониана являются смешанными за исключением исходной задачи с $\lambda = 0$ и при $\alpha \rightarrow \pi$,

если $|V_{12}| \ll |V_{11} - V_{22}|$ и $\lambda \rightarrow \infty$, когда состояния $|1\rangle$ и $|2\rangle$ меняются местами: первое имеет большую энергию, чем второе.

Задача с двумя уровнями находит применение не только в случае, например, двух спиновых состояний для частицы со спином $1/2$, но и в таких ситуациях, когда энергетическая щель между парой низших уровней энергии и их возбуждениями достаточно велика, чтобы можно было пренебречь вкладами от высших поправок от возбужденных состояний, в то время как эффекты смешивания за счет введения V велики и не могут быть рассмотрены как малые поправки в системе двух низших состояний.

1.2. Нестационарная теория

Постановка задачи в нестационарной теории несколько отличается от стационарной, так как в последнем случае нам достаточно было определить поправки к энергиям и состояниям, для того чтобы до конца решить задачу нахождения состояний в произвольный момент времени в виде суперпозиций стационарных.

При введении возмущения, зависящего от времени,

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \lambda V(t),$$

полагают, что в начальный момент времени t'

$$V(t') = 0.$$

Пусть до “включения” возмущения система находилась в одном из стационарных состояний гамильтониана \hat{H}_0 :

$$\hat{H}_0 |i\rangle = E_i^{(0)} |i\rangle, \quad (1.32)$$

так что $|i\rangle$ — начальное (initial) состояние эволюции, которая определялась согласно

$$|i(t)\rangle_0 = U_0(t, t') |i\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} E_i^{(0)}(t-t')} |i\rangle,$$

где оператор эволюции

$$U_0(t, t') = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 (t-t')}.$$

При включении возмущения, зависящего от времени, оператор эволюции в общем виде принимает вид «тэ-экспоненты»:

$$U(t, t') = \hat{T} \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \int_{t'}^t \hat{H}(t) dt \right\}, \quad (1.33)$$

который удовлетворяет уравнению

$$i\hbar \frac{\partial U}{\partial t} = \hat{H} U, \quad U(t', t') = \mathbb{1}. \quad (1.34)$$

Состояние в момент времени t —

$$|i(t)\rangle = U(t, t') |i\rangle.$$

Рассмотрим эволюцию в базисе состояний “представления взаимодействия”

$$|i(t)\rangle_I = U_0^\dagger(t, t') |i(t)\rangle \stackrel{\text{def}}{=} U_I(t, t') |i\rangle, \quad (1.35)$$

откуда

$$U(t, t') = U_0(t, t') U_I(t, t'). \quad (1.36)$$

Если возмущение мало, то состояние $|i(t)\rangle_I$ мало отличается от начального $|i\rangle$.

Подставляя определение оператора эволюции (1.36) в уравнение (1.35), легко находим

$$i\hbar \frac{\partial U}{\partial t} = i\hbar \frac{\partial U_0}{\partial t} U_I + U_0 i\hbar \frac{\partial U_I}{\partial t} = \hat{H}_0 U_0 U_I + U_0 i\hbar \frac{\partial U_I}{\partial t},$$

так что вклад с \hat{H}_0 с обеих сторон уравнения сокращается и

$$i\hbar \frac{\partial U_I}{\partial t} = \lambda V_I U_I, \quad (1.37)$$

где потенциал в представлении взаимодействия

$$V_I = U_0^\dagger V U_0. \quad (1.38)$$

Разложение в ряд по λ решения уравнения для оператора эволюции в представлении взаимодействия

$$U_I(t, t') = \hat{T} \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \lambda \int_{t'}^t V_I(t) dt \right\}$$

дает построение последовательных приближений по степеням константы связи $\lambda \rightarrow 0$.

Ведущее приближение. В первом порядке по λ

$$U(t, t') = \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \lambda \int_{t'}^t V_I(t) dt. \quad (1.39)$$

Пусть $|f\rangle$ состояние из спектра исходного гамильтониана. Значит, амплитуда вероятности найти начальное состояние в момент времени t в конечном (final) состоянии $|f\rangle$ в ведущем порядке по константе связи равно

$$\langle f | U_I(t, t') | i \rangle \approx -\lambda \frac{i}{\hbar} \int_{t'}^t \langle f | V_I(t) | i \rangle dt, \quad |f\rangle \neq |i\rangle. \quad (1.40)$$

Для матричного элемента, очевидно, имеем

$$\langle f | V_I(t) | i \rangle = \langle f | U_0^\dagger(t, t') V(t) U_0(t, t') | i \rangle = \langle f | V(t) | i \rangle e^{i\omega_{fi}(t-t')},$$

где

$$\langle f | V(t) | i \rangle = V_{fi}(t)$$

есть матричный элемент возмущения, и частота “перехода”

$$\omega_{fi} = \frac{1}{\hbar} (E_f^{(0)} - E_i^{(0)}).$$

Если конечное состояние находится в дискретном спектре, то, возводя в квадрат модуль амплитуды

$$A_{fi} = -\lambda \frac{i}{\hbar} \int_{t'}^t V_{fi}(t) e^{i\omega_{fi}(t-t')} dt, \quad (1.41)$$

получаем вероятность перехода из начального состояния в конечное

$$W_{i \rightarrow f} = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_{t'}^t \lambda V_{fi}(t) e^{i\omega_{fi}(t-t')} dt \right|^2, \quad (1.42)$$

и в случае непрерывного спектра — плотность вероятности

$$\frac{dW_{i \rightarrow f}}{d\nu} = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_{t'}^t \lambda V_{fi}(t) e^{i\omega_{fi}(t-t')} dt \right|^2, \quad (1.43)$$

где состояния нормированы стандартным способом: $\langle \nu' | \nu \rangle = \delta(\nu' - \nu)$.

1.2.1. Постоянное возмущение

Если

$$\lambda V(t) = \bar{V} \theta(t - t'),$$

то квадрат модуля амплитуды

$$W = |\bar{V}_{fi}|^2 \left(\frac{2 \sin[\omega_{fi}(t - t')/2]}{\hbar \omega_{fi}} \right)^2, \quad (1.44)$$

характерное поведение которого на конечных временах показано на рис. 1.2.

Значит, постоянное возмущение с ненулевыми недиагональными матричными элементами по состояниям исходного гамильтониана за конечное время Δt приводит к переходам с частотой

$$\Delta t \cdot \omega_{fi} \sim 1, \quad (1.45)$$

в то время как переходы с другими частотами подавлены.

Если трактовать измерение спектра системы как введение малого возмущения, то, как видим, только бесконечно длительное наблюдение за стационарным состоянием позволяет избежать возбуждения других состояний, и при конечном времени измерения всегда возникает неопределенность энергии за счет переходов на другие уровни, причем имеет место соотношение неопределенности время–энергия.

При $t' \rightarrow -\infty$, $t \rightarrow +\infty$ возмущение действует бесконечно долго, так что амплитуда перехода

$$-\frac{i}{\hbar} \bar{V}_{fi} 2\pi \delta(\omega_{fi}),$$

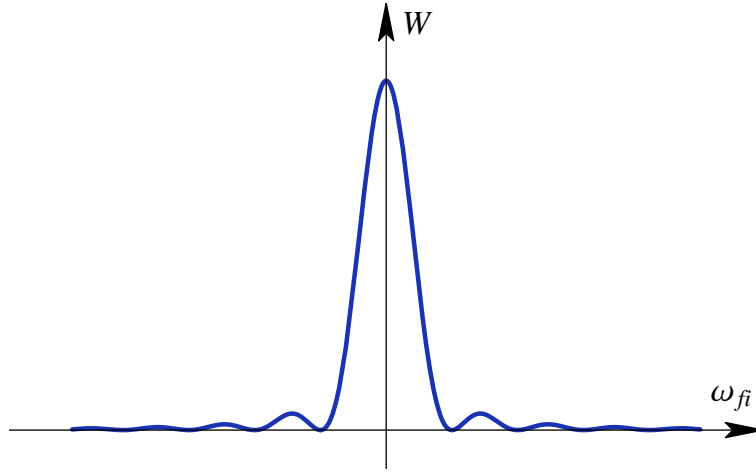


Рис. 1.2: Поведение квадрата амплитуды перехода на конечных временах в зависимости от частоты перехода.

и она формально обращается в нуль при $\omega_{fi} \neq 0$ на фоне вклада начального состояния, в то время как

$$2\pi\delta(\omega)\Big|_{\omega \rightarrow 0} = \int_{t' \rightarrow -\infty}^{t \rightarrow +\infty} e^{i\omega t} dt \Big|_{\omega \rightarrow 0} = (t - t') \rightarrow \infty,$$

и мы получаем поправку к эволюции за счет смещения уровня

$$E_i = E_i^{(0)} + \bar{V}_{ii},$$

так как

$$U_0(t, t') U_I(t, t') \mapsto \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} (E_i^{(0)} + \bar{V}_{ii})(t - t') \right\}.$$

При конечных временах и $\omega_{fi}(t - t') \gg 1$ амплитуда перехода —

$$A_{fi} = -\frac{1}{\hbar\omega_{fi}} \bar{V}_{fi} \left\{ 1 - e^{-i\omega_{fi}(t - t')} \right\} e^{i\omega_{fi}(t - t')}.$$

Заметим, что в представлении взаимодействия матричные элементы операторов отличаются от матричных элементов по состояниям в представлении Гейзенберга, которое фактически используется в стационарной теории возмущений:

$$\langle f | U_0^\dagger(t, t') \hat{F} U_0(t, t') | i \rangle = e^{i\omega_{fi}(t - t')} \langle f | \hat{F} | i \rangle,$$

что, естественно, никак не сказывается на вероятности, определяемой модулем амплитуды.

Поэтому вычисленная нами выше амплитуда может быть связана с амплитудой смешивания стационарных состояний \tilde{A}_{fi} согласно

$$A_{fi} = e^{i\omega_{fi}(t - t')} \tilde{A}_{fi},$$

где уже

$$\tilde{A}_{fi} = -\frac{1}{\hbar\omega_{fi}} \bar{V}_{fi} \left\{ 1 - e^{-i\omega_{fi}(t-t')} \right\}, \quad (1.46)$$

и это — величина, которая сильно осциллирует при малом изменении интервала времени, и значит, имеет смысл взять ее среднее значение по периоду, так что экспонента “выпадает”, и в среднем амплитуда не зависит от времени

$$\bar{A}_{fi} = -\frac{\bar{V}_{fi}}{\hbar\omega_{fi}} = \frac{\bar{V}_{fi}}{E_i^{(0)} - E_f^{(0)}}, \quad (1.47)$$

что, конечно, воспроизводит результат стационарной теории возмущений для амплитуды примеси к начальному состоянию. Поэтому критерий применимости теории возмущений в этом случае остается без изменений.

Итак, мы убедились, что подстановка постоянного возмущения согласуется с теорией возмущений в стационарном случае.

1.2.2. Периодическое возмущение

Амплитуда перехода за счет периодического возмущения, равного нулю при $t = t'$,

$$\lambda V(t) = \frac{1}{i} \left\{ \bar{V} e^{i\omega(t-t')} - \bar{V}^\dagger e^{-i\omega(t-t')} \right\}$$

принимает вид интерференции двух вкладов

$$A_{fi} = -i \left\{ \frac{\bar{V}_{fi}}{\hbar(\omega_{fi} + \omega)} \left(1 - e^{i(\omega_{fi} + \omega)(t-t')} \right) - \frac{\bar{V}_{fi}^\dagger}{\hbar(\omega_{fi} - \omega)} \left(1 - e^{i(\omega_{fi} - \omega)(t-t')} \right) \right\},$$

анализ каждого из которых вполне аналогичен рассмотрению постоянного возмущения, но физические выводы существенно отличаются. Так, во-первых, при $|(\omega_{fi} \pm \omega)(t - t')| \gg 1$ сильно осциллирующие со временем экспоненты “вымирают”, и амплитуда обращается в нуль в силу эрмитовости возмущения.

Во-вторых, при $\omega_{fi} \pm \omega \rightarrow 0$ имеет место резонанс, который мы рассмотрим при длительном действии возмущения: $t' \rightarrow -\infty$, $t \rightarrow +\infty$. Тогда интегрирование в (1.41) дает

$$A_{fi} = \frac{i}{\hbar} \bar{V}_{fi} \{ 2\pi\delta(\omega_{fi} + \omega) - 2\pi\delta(\omega_{fi} - \omega) \}. \quad (1.48)$$

Считая частоту возмущения положительной по определению, заключаем, что один из вкладов отличен от нуля, либо когда имеет место возбуждение уровня $\omega_{fi} = \omega$ — вынужденное поглощение энергии квантовой системой за счет возмущения, либо когда происходит переход с вышележащего уровня на низлежащий $\omega_{fi} = -\omega$ — вынужденное излучение энергии квантовой системой. При этом мы установили, что амплитуды индуцированного¹ поглощения и излучения по модулю равны друг другу.

В случае излучения, например,

$$|A_{fi}|^2 = \frac{1}{\hbar^2} |\bar{V}_{fi}|^2 2\pi\delta(\omega_{fi} + \omega) 2\pi\delta(\omega_{fi} + \omega) \Big|_{\omega_{fi} + \omega \rightarrow 0} = \frac{1}{\hbar^2} |\bar{V}_{fi}|^2 2\pi\delta(\omega_{fi} + \omega) (t - t'),$$

¹Т.е. вынужденного.

где мы опять воспользовались выражением для дельта-функции от частоты при нулевом значении аргумента через полный временной интервал действия возмущения. Поэтому имеет смысл говорить о вероятности (плотности вероятности) перехода системы за единичное время:

$$w_{fi} = \frac{d|A_{fi}|^2}{dt} = \frac{1}{\hbar} |\bar{V}_{fi}|^2 2\pi\delta(E_f^{(0)} - E_i^{(0)} + \hbar\omega), \quad (1.49)$$

причем мы внесли \hbar под знак дельта-функции. Если конечное состояние находится в непрерывном спектре, то получаем “золотое правило Ферми” для дифференциальной вероятности перехода за единичное время:

$$dw_{fi} = \frac{1}{\hbar} |\bar{V}_{fi}|^2 2\pi\delta(E_f^{(0)} - E_i^{(0)} + \hbar\omega) d\nu(E_f^{(0)}), \quad (1.50)$$

где $d\nu(E_f^{(0)})$ — дифференциальная плотность состояний с заданной энергией конечного состояния.

Подчеркнем, что согласно формулам (1.49), (1.50) бесконечно длительное воздействие периодического возмущения приводит к точному закону сохранения энергии для уровней исходной системы в смысле квантового характера поглощения и излучения энергии.

Если интегральная вероятность перехода из одного состояния в другое за единицу времени w_{fi} , то вводят величину τ с размерностью времени

$$w_{fi} = \frac{1}{\tau}. \quad (1.51)$$

Тогда, если рассмотреть N идентичных систем в момент времени t , то за время dt вероятность распада

$$-\frac{dN(t)}{N(t)} = \frac{dt}{\tau}, \quad (1.52)$$

что легко интегрируется, и

$$N(t) = N_0 e^{-\frac{t}{\tau}}. \quad (1.53)$$

Согласно этому уравнению τ называют временем жизни системы, если имеет место индуцированное излучение, или временем возбуждения, если происходит вынужденное поглощение. При этом совершенно ясно, что по прошествии времени τ вероятность индуцированного излучения или поглощения становится близка к единице. Поэтому логично считать критерием применимости теории возмущений для периодического возмущения не малость вероятности перехода, а несколько иной показатель. Именно, единственным условием, которое должно с необходимостью выполняться в ходе вывода выражения для вероятности перехода в единицу времени, была достаточная длительность воздействия возмущения, много большая, чем период колебаний возмущения. Этого всегда можно достичь, если только время жизни уровня много больше периода колебаний возмущения:

$$\tau \gg \frac{1}{\omega}. \quad (1.54)$$

Поскольку частота связана с разностью энергий уровней $\hbar\omega = |E_f^{(0)} - E_i^{(0)}| = \Delta E$, это условие применимости расчета вероятности перехода за счет периодического возмущения можно представить в виде

$$\Gamma \ll \Delta E, \quad (1.55)$$

где

$$\Gamma = \frac{\hbar}{\tau} \quad (1.56)$$

называют шириной перехода. В задаче с постоянным возмущением мы видели, что дельта-функция, отвечающая закону сохранения энергии, возникает в пределе бесконечно длительного воздействия возмущения. В случае же конечного времени воздействия имеется конечная ширина распределения по энергии, которая связана с временем воздействия соотношением неопределенности время-энергия. Этот вывод, очевидно, остается справедливым и для периодического возмущения: просто центр распределения на рис. 1.2 смещается с нуля к величине $\Delta E/\hbar$. Поскольку характерное время перехода — τ , соответствующая неопределенность в определении энергии перехода — $\hbar/\tau = \Gamma$. Поэтому, например, ширина перехода определяет в процессе вынужденного излучения точность определения энергии распадающегося уровня, т.е. ширину уровня.

Другое условие применимости теории возмущений — сходимость ряда по константе связи λ . Степень сходимости можно установить, только вычислив следующую по λ поправку к ширине перехода $\Gamma^{(2)}$ и убедившись, что $\Gamma^{(2)} \ll \Gamma$.

1.2.3. Мгновенное включение возмущения

При рассмотрении постоянного возмущения мы полагали, что в момент включения возмущения от нулевого значения до \bar{V} состояние системы точно совпадало с одним из квантовых уровней невозмущенной, исходной системы с гамильтонианом \hat{H}_0 . Однако это предположение нуждается в более детальном исследовании, так как необходимо установить точность такого приближения, учитывая фактическую конечность интервала времени изменения потенциала, и обсудить возможную связь с соотношением неопределенности время-энергия.

Для простоты обозначений будем считать, что в начальный момент времени $t' = 0$ возмущение быстро возрастает с нуля до величины \bar{V} за малое время δt ,

$$\lambda V(t) = \bar{V}(s), \quad t = \delta t \cdot s, \quad s \in [0, 1]. \quad (1.57)$$

Гамильтониан как функция параметра s

$$\hat{H}(s) = \hat{H}_0 + \bar{V}(s).$$

Оператор эволюции в первом приближении по малому δt

$$U(\delta t) = \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \int_0^1 \hat{H}(s) \delta t \, ds = \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \delta t \bar{H}, \quad (1.58)$$

где мы ввели “среднее значение” гамильтониана

$$\bar{H} = \int_0^1 \hat{H}(s) \, ds. \quad (1.59)$$

Теперь сразу видно, что

$$\lim_{\delta t \rightarrow 0} U(\delta t) = \mathbb{1}, \quad (1.60)$$

т.е. при мгновенном изменении потенциала начальное состояние действительно не изменяется.

Вычислим вероятность найти систему в момент времени δt в состоянии, отличном от начального:

$$w = \sum_{f \neq i} |\langle f | U(\delta t) | i \rangle|^2 = \sum_{f \neq i} \langle i | U^\dagger(\delta t) | f \rangle \langle f | U(\delta t) | i \rangle. \quad (1.61)$$

В силу полноты базиса

$$\sum_{f \neq i} |f\rangle \langle f| = \mathbb{1} - |i\rangle \langle i| = \bar{P}_i$$

есть проектор на пространство, ортогональное исходному состоянию, так что

$$w = \langle i | U^\dagger(\delta t) \bar{P}_i U(\delta t) | i \rangle.$$

В ведущем приближении использование ортогональности дает

$$\langle i | U^\dagger(\delta t) \bar{P}_i = \frac{i}{\hbar} \delta t \langle i | \bar{H} \bar{P}_i, \quad \bar{P}_i U(\delta t) | i \rangle = -\frac{i}{\hbar} \delta t \bar{P}_i \bar{H} | i \rangle,$$

и значит,

$$w = \frac{1}{\hbar^2} (\delta t)^2 \langle i | \bar{H} \bar{P}_i \bar{H} | i \rangle = \frac{1}{\hbar^2} (\delta t)^2 \{ \langle i | \bar{H} \bar{H} | i \rangle - \langle i | \bar{H} | i \rangle^2 \}.$$

Но выражение в фигурных скобках есть ничто иное как квадрат флуктуации $\delta \bar{H}$ среднего значения гамильтониана,

$$w = \frac{1}{\hbar^2} (\delta t \cdot \delta \bar{H})^2. \quad (1.62)$$

поэтому вероятность возбуждения состояний, отличных от начального, пренебрежимо мала $w \ll 1$, если

$$\delta t \cdot \delta \bar{H} \ll \hbar. \quad (1.63)$$

Ясно, что флуктуация среднего значения гамильтониана $\delta \bar{H} \sim \delta E$ определяется величиной малого возмущения $\delta E \sim V$.

Согласно соотношению неопределенности время–энергия при флуктуации энергии на величину δE состояние, а значит, его волновая функция существенно, т.е. физически значимо, изменится за время

$$\Delta t \geq \frac{\hbar}{\delta E}.$$

Таким образом, включение возмущения можно считать мгновенным, если состояние не успевает измениться за время δt ,

$$\delta t \ll \Delta t \sim \frac{\hbar}{\delta \bar{H}}, \quad (1.64)$$

т.е. интервал времени для инициации возмущения много меньше характерного времени изменения волновой функции за счет изменения энергии.

1.2.4. Адиабатическое возмущение

Рассмотрим задачу определения состояния системы в результате медленного изменения со временем параметров гамильтониана.

Пусть гамильтониан зависит от p параметров $\{a_\mu\} = \mathbf{a}$, где $\mu = \{\overline{1, p}\}$, и нам известны нормированные собственные состояния этого гамильтониана

$$\hat{H}(\mathbf{a}) |\psi_n(\mathbf{a})\rangle = E_n(\mathbf{a}) |\psi_n(\mathbf{a})\rangle, \quad (1.65)$$

причем состояния являются невырожденными ни при каких \mathbf{a} , т.е. любые две функции из набора $E_n(\mathbf{a})$ не пересекаются.

Будем считать, что параметры медленно меняются со временем, если

$$\mathbf{a} = \mathbf{a}(s), \quad t = T \cdot s, \quad s \in [0; 1], \quad T \rightarrow \infty. \quad (1.66)$$

Построим по собственным состояниям гамильтониана “адиабатические” состояния, удовлетворяющие уравнению

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi^A(t, \mathbf{a})\rangle = \hat{H}(\mathbf{a}) |\psi^A(t, \mathbf{a})\rangle, \quad (1.67)$$

а именно,

$$|\psi_n^A(t, \mathbf{a})\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} T \int_0^s E_n(s) ds} |\psi_n(\mathbf{a})\rangle, \quad (1.68)$$

где

$$E_n(s) = E_n(\mathbf{a}(s)).$$

Введем обозначение для интегральной фазы размерности частоты

$$\varphi_n(s) = \frac{1}{\hbar} \int_0^s E_n(s) ds, \quad (1.69)$$

так что

$$|\psi_n^A(t, \mathbf{a})\rangle = e^{-iT\varphi_n(s)} |\psi_n(\mathbf{a})\rangle.$$

Однако, построенные таким способом “адиабатические” состояния не удовлетворяют уравнению Шредингера (!), так как полная производная состояния по времени включает в себя и вклад за счет изменения параметров гамильтониана

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} |\psi_n^A(t, \mathbf{a})\rangle &= i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi_n^A(t, \mathbf{a})\rangle + i\hbar \frac{1}{T} \dot{\mathbf{a}} \frac{\partial}{\partial \mathbf{a}} |\psi_n^A(t, \mathbf{a})\rangle \\ &= E_n(s) |\psi_n^A(t, \mathbf{a})\rangle + i\hbar \frac{1}{T} \dot{\mathbf{a}} \frac{\partial}{\partial \mathbf{a}} |\psi_n^A(t, \mathbf{a})\rangle, \end{aligned}$$

где $\dot{\mathbf{a}} = d\mathbf{a}/ds$. Как видим, возникающая поправка может быть мала при $T \rightarrow \infty$ как $\mathcal{O}(1/T)$, если параметры имеют конечные производные по s и состояния также умеренно зависят от \mathbf{a} . Производную по параметрам доминирующего при заданном n состояния можно разложить по базису $|\psi_k(\mathbf{a})\rangle$. Поэтому будем искать решение уравнения в виде

$$|\psi_n(t)\rangle = c_n(s) |\psi_n^A(t, \mathbf{a})\rangle + \sum_{k \neq n} c_k(s) e^{-iT\{\varphi_n(s) - \varphi_k(s)\}} |\psi_k^A(t, \mathbf{a})\rangle, \quad (1.70)$$

где по построению

$$c_n(s) = e^{i\gamma(s)} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{T}\right), \quad |e^{i\gamma(s)}| = 1, \quad c_n(0) = 1,$$

и

$$|c_k(s)| = \mathcal{O}\left(\frac{1}{T}\right), \quad k \neq n, \quad c_k(0) = 0,$$

причем, в отличие от стационарного случая, мы не можем нормировать ведущий вклад $|c_n(s)|$ точно на единицу при любом значении s , потому что уравнение Шредингера не допускает перемасштабирование состояний факторами, зависящими от времени.

Адиабатическое приближение. Оставляя лидирующий член в разложении (1.70) и подставляя его в уравнение Шредингера, найдем

$$-\dot{\gamma}(s) |\psi_n^A(t, \mathbf{a})\rangle + i \dot{\mathbf{a}} \frac{\partial}{\partial \mathbf{a}} |\psi_n^A(t, \mathbf{a})\rangle = 0, \quad (1.71)$$

так что проектирование на основное состояние $\langle \psi_n(\mathbf{a}) | \bullet \rangle$ дает

$$d\gamma = i d\mathbf{a}^\mu \langle \psi_n(\mathbf{a}) | \partial_\mu^a |\psi_n(\mathbf{a})\rangle, \quad \partial_\mu^a = \frac{\partial}{\partial a^\mu}. \quad (1.72)$$

Значит, в адиабатическом приближении

$$|\psi_n(t)\rangle = e^{-iT\varphi_n(s) + i \int_0^s d\mathbf{a}^\mu \mathcal{A}_\mu(\mathbf{a})} |\psi_n(\mathbf{a})\rangle, \quad (1.73)$$

где “поле”

$$\mathcal{A}_\mu(\mathbf{a}) = i \langle \psi_n(\mathbf{a}) | \partial_\mu^a |\psi_n(\mathbf{a})\rangle. \quad (1.74)$$

Проектирование уравнения (1.71) на состояние, отличное от основного дает “невязку”, которая может быть компенсирована поправкой первого порядка. Действительно, оставляя с обеих сторон уравнения Шредингера после проектирования $\langle \psi_k(\mathbf{a}) | \bullet \rangle$ только вклады порядка $1/T$, находим

$$\frac{i\hbar}{T} c_n(s) \dot{\mathbf{a}} \langle \psi_k(\mathbf{a}) | \partial_\mu^a |\psi_n(\mathbf{a})\rangle = c_k(s) \{E_k(s) - E_n(s)\}. \quad (1.75)$$

Недиагональный матричный элемент $\langle \psi_k(\mathbf{a}) | \partial_\mu^a |\psi_n(\mathbf{a})\rangle$ можно вычислить, дифференцируя по параметру уравнение на собственные значения гамильтониана (1.65)

$$\{\partial_\mu^a \hat{H}(\mathbf{a})\} |\psi_k(\mathbf{a})\rangle + \hat{H}(\mathbf{a}) \partial_\mu^a |\psi_k(\mathbf{a})\rangle = \{\partial_\mu^a E_k\} |\psi_k(\mathbf{a})\rangle + E_k \partial_\mu^a |\psi_k(\mathbf{a})\rangle,$$

и проектируя на $|\psi_n(\mathbf{a})\rangle$:

$$\langle \psi_n(\mathbf{a}) | \{\partial_\mu^a \hat{H}(\mathbf{a})\} |\psi_k(\mathbf{a})\rangle = \{E_k(s) - E_n(s)\} \langle \psi_n(\mathbf{a}) | \partial_\mu^a |\psi_k(\mathbf{a})\rangle. \quad (1.76)$$

В итоге,

$$c_k(s) = \frac{1}{T} \frac{i\hbar}{\{E_k(s) - E_n(s)\}^2} \dot{\mathbf{a}}^\mu \langle \psi_n(\mathbf{a}) | \{\partial_\mu^a \hat{H}(\mathbf{a})\} |\psi_k(\mathbf{a})\rangle = \mathcal{O}\left(\frac{1}{T}\right). \quad (1.77)$$

Подчеркнем, что $c_k(0) = 0$, если только начальная скорость изменения параметров обращается в нуль $\dot{\mathbf{a}}^\mu(0) = 0$. В противном случае за малый интервал δs система эволюционирует

долгое время $\delta T = \delta s \cdot T \rightarrow \infty$, так что в состоянии появляется примесь состояний с другими квантовыми числами и уже $c_k(0) \neq 0$, но тогда достаточно считать, что $c_k(0) \sim \mathcal{O}(1/T)$, т.е. опять же бесконечно малая величина в адиабатическом пределе.

Критерий адиабатичности изменения параметров гамильтониана немедленно следует из выражения для амплитуд примеси состояний отличного от исходного (1.77), если считать, что

$$|c_k(s)| \ll 1.$$

Поскольку $\Delta s \sim 1$, а $\dot{a}^\mu \partial_\mu^a \hat{H} \sim (\Delta a / \Delta s) (\Delta E / \Delta a) \sim \Delta E$, обозначая $E_k - E_n = \hbar \omega$, заключаем, что

$$T \omega^2 \frac{\hbar}{\Delta E} \gg 1, \quad (1.78)$$

или вводя характерное время изменения состояния $\Delta t = \hbar / \Delta E$ при изменении энергии на ΔE и период излучения для переходов между уровнями $T_\omega \sim 1/\omega$ — период собственных колебаний в системе, находим

$$T \gg \Delta t \frac{T_\omega^2}{\Delta t^2} \sim T_\omega \frac{T_\omega}{\Delta t}, \quad (1.79)$$

т.е. время изменения параметров T должно быть много больше характерного времени изменения состояния Δt при изменении энергии с учетом фактора квадрата отношения периода собственных колебаний к времени изменения состояния, или время изменения параметров должно быть существенно больше периода собственных колебаний с учетом фактора отношения периода к характерному времени изменения состояния при флуктуации энергии.

Критерий выглядит намного проще, если изменение энергии порядка расстояния между уровнями (которые сдвигаются так, чтобы по-прежнему не пересекаться), т.е. если $\Delta E \sim \hbar \omega$ или, что то же, $T_\omega \sim \Delta t$:

$$T \gg T_\omega \Leftrightarrow \omega T \ll \omega, \quad (1.80)$$

а значит, время адиабатического изменения гамильтониана должно быть много больше периода собственных колебаний в системе, или частоты собственных колебаний много больше характерной частоты изменения параметров.

Таким образом, мы обосновали законность адиабатического приближения

$$|\psi_n(t)\rangle \approx e^{i \int_0^t da^\mu \mathcal{A}_\mu(\mathbf{a})} |\psi_n^A(t, \mathbf{a})\rangle, \quad \mathcal{A}_\mu(\mathbf{a}) = i \langle \psi_n(\mathbf{a}) | \partial_\mu^a | \psi_n(\mathbf{a}) \rangle, \quad (1.81)$$

согласно которому состояние аппроксимируется единственным собственным адиабатическим вкладом с точностью до фазы, определяемой зависимостью базиса состояний от медленно меняющихся параметров.

Фаза Берри. Правильное адиабатическое состояние $|\psi_n^A(\mathbf{a})\rangle$ отличается от исходного статического состояния $|\psi_n(\mathbf{a})\rangle$ экспоненциальным фактором

$$|\psi_n^A(\mathbf{a})\rangle = e^{i \int_0^s da^\mu \mathcal{A}_\mu(\mathbf{a})} |\psi_n(\mathbf{a})\rangle, \quad (1.82)$$

с фазой

$$\gamma(s) = \int_0^s da^\mu \mathcal{A}_\mu(\mathbf{a}). \quad (1.83)$$

Рассмотрим эту фазу более подробно в случае, когда адиабатическое изменение параметров гамильтониана является *циклическим*, т.е. по прошествии времени T параметры принимают свои начальные значения

$$\mathbf{a}(1) = \mathbf{a}(0).$$

Тогда

$$\gamma(1) = \Delta_c \gamma = \oint da^\mu \mathcal{A}_\mu(\mathbf{a}) \quad (1.84)$$

есть цикл фазы, выражаемый циркуляцией вектора поля \mathcal{A}_μ по контуру в пространстве параметров \mathbf{a} , и этот цикл называют топологической или геометрической фазой Берри. Естественно, фаза Берри определена по модулю 2π , т.е. с точностью до ненаблюдаемого сдвига на $2\pi n$, $n \in \mathbb{Z}$.

Переопределим фазу исходного состояния как функции в пространстве параметров, сохраняя тем самым нормировку,

$$|\psi_n(\mathbf{a})\rangle^u = e^{-iu(\mathbf{a})} |\psi_n(\mathbf{a})\rangle. \quad (1.85)$$

Тогда изменится и поле

$$\mathcal{A}_\mu^u(\mathbf{a}) = i^u \langle \psi_n(\mathbf{a}) | \partial_\mu^a | \psi_n(\mathbf{a}) \rangle^u = \mathcal{A}_\mu(\mathbf{a}) - \partial_\mu^a u(\mathbf{a}), \quad (1.86)$$

что есть ничто иное как калибровочное преобразование с функцией $u(\mathbf{a})$.

Поэтому цикл фазы станет равным

$$\Delta_c \gamma^u = \Delta_c \gamma - \Delta_c u. \quad (1.87)$$

Таким образом, фаза Берри определена с точностью до геометрической фазы исходного состояния, которая, в силу произвольности, не несет на себе динамического смысла. Поэтому имеет смысл выбирать фазу исходного состояния в виде однозначной функции в пространстве параметров, а также считать и калибровочную функцию $u(\mathbf{a})$ однозначной.

Итак, *если исходное состояние имеет тривиальную геометрическую фазу при циклическом изменении параметров гамильтониана, то это состояние при адиабатическом циклическом изменении параметров гамильтониана во времени приобретает нетривиальную геометрическую фазу, которая носит имя Берри.*

Если условие тривиальности топологической фазы исходного состояния выполнено (интегрирование по частям имеет место с нулевыми граничными вкладами), то можно воспользоваться теоремой Стокса для контурного интеграла вектора, выразив его через интеграл от ротора по поверхности, границей которого является контур. При произвольном числе измерений параметрического пространства эта процедура наиболее корректно записывается в терминах дифференциальных форм. В трехмерном же случае получаем

$$\oint_{\partial S} d\mathbf{a} \mathcal{A}(\mathbf{a}) = \int_S d\mathbf{s} \operatorname{rot} \mathcal{A}(\mathbf{a}), \quad (1.88)$$

что указывает на калибровочную инвариантность интеграла (ротор градиента равен нулю), если калибровочная функция $u(\mathbf{a})$ является однозначной.

Из-за наличия динамической фазы бесконечно малые трансляции правильного адиабатического состояния $|\psi_n^A(\mathbf{a})\rangle$ задаются оператором

$$T(d\mathbf{a}) = \mathbb{1} + d\mathbf{a}^\mu \nabla_\mu^a, \quad \nabla_\mu^a = \partial_\mu^a + i\mathcal{A}_\mu, \quad (1.89)$$

где ∇_μ^a называется ковариантной производной. Инфинитезимальные трансляции правильного адиабатического состояния из одной точки в другую по двум путям отличаются друг от друга только фазой – циклом по замкнутому пути:

$$T(d\mathbf{a})T(d\mathbf{b}) = T(d\mathbf{b})T(d\mathbf{a})e^{i\Delta_c\gamma},$$

откуда

$$i\Delta_c\gamma = d\mathbf{a}^\mu d\mathbf{b}^\nu [\nabla_\mu, \nabla_\nu] = i d\mathbf{a}^\mu d\mathbf{b}^\nu (\partial_\mu \mathcal{A}_\nu - \partial_\nu \mathcal{A}_\mu). \quad (1.90)$$

Можно ввести тензор напряженности поля через коммутатор ковариантных производных:

$$F_{\mu\nu} = \partial_\mu \mathcal{A}_\nu - \partial_\nu \mathcal{A}_\mu = -i[\nabla_\mu, \nabla_\nu], \quad (1.91)$$

так что, переходя от бесконечно малых замкнутых петель к конечным, находим, что интеграл поля по замкнутому контуру сводится к интегралу от калибровочно инвариантной напряженности поля по площади, “натянутой” на контур.

В трехмерном случае, если параметры изменяются на сфере, то площадь петли определяется телесным углом, поэтому говорят, что геометрическая фаза Берри пропорциональна телесному углу, заметаемому петлей на сфере (теорема о телесном угле).

Задача 1. Найти фазу Берри для спинового состояния электрона, ориентированного по магнитному полю, которое адиабатически вращается по окружности вокруг оси z (см. рис. 1.3).

Решение. Исходное состояние спина $1/2$, ориентированного вдоль единичного вектора магнитного поля $\mathbf{n} = \mathcal{H}/\mathcal{H} = (\sin\theta \cos\phi, \sin\theta \sin\phi, \cos\theta)$, имеет вид

$$|\uparrow\rangle = \cos\frac{\theta}{2}|+\rangle + e^{i\phi}\sin\frac{\theta}{2}|-\rangle,$$

где $|\pm\rangle$ — состояния с положительной и отрицательной проекциями спина на ось z , и мы выбрали фазовый фактор так, чтобы он давал однозначную функцию угла ϕ , так как при адиабатическом вращении магнитного поля вокруг оси z , именно этот угол и является параметром изменения гамильтониана. Тогда поле

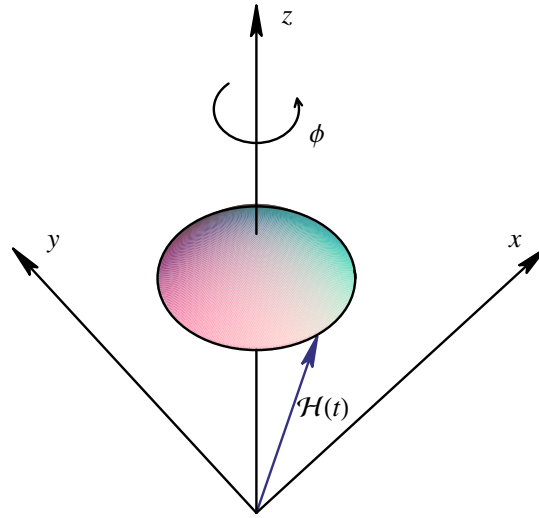
$$\mathcal{A}_\phi = i\langle\uparrow|\partial_\phi|\uparrow\rangle = -\sin^2\frac{\theta}{2} = \frac{1}{2}(\cos\theta - 1)$$

не зависит от ϕ , и фаза Берри

$$\Delta_c\gamma = \int_0^{2\pi} d\phi \mathcal{A}_\phi = \pi(\cos\theta - 1).$$

Заметим, что окружность, описываемая вектором магнитного поля на сфере, “заметает” телесный угол

$$\Omega = \int_{\cos\theta}^1 d\cos\theta \int_0^{2\pi} d\phi = 2\pi(1 - \cos\theta),$$

Рис. 1.3: Вращение магнитного поля вокруг оси z .

так что фаза Берри

$$\Delta_c \gamma = -\mathfrak{s} \Omega,$$

где $\mathfrak{s} = 1/2$ — проекция спина на ось магнитного поля. Можно убедиться, что последняя формула справедлива и для $\mathfrak{s} = -1/2$: состояние против оси поля $|\downarrow\rangle = -\sin \frac{\theta}{2} |+\rangle + e^{i\phi} \cos \frac{\theta}{2} |-\rangle$, откуда $\mathcal{A}_\phi = -(\cos \theta + 1)/2$, и $\Delta_c \gamma = -\pi(\cos \theta + 1) + 2\pi = -\pi(\cos \theta - 1)$, где мы добавили ненаблюдаемую фазу 2π . ■

Фаза Берри наблюдается экспериментально, как, например, в опытах по вращению спина нейтрона в адиабатически вращающемся магнитном поле, так и в ставших классическими экспериментах по вращению поляризации света при движении по изогнутому световоду.

Тема 2

Сложение моментов

Лекция № 2

Тензорное произведение векторных величин в классической физике и наглядное представление о разложении произведения в сумму по неприводимым тензорам, постановка задачи о сложении моментов в квантовой механике, базис состояний и квантовые числа суммарного момента, допустимые значения проекции и модуля суммы моментов, коэффициенты Клебша–Гордана, число состояний, задача о сложении $j = 1$ и $j = 1/2$, закон преобразования неприводимых тензорных операторов с заданным моментом и его проекцией в стандартном представлении, коммутационные соотношения с моментом, самый общий вид неприводимого тензорного оператора и теорема Вигнера–Эккарта, сферические гармоники как неприводимые тензорные функции в стандартном представлении, правила отбора для матричных элементов тензорных операторов и запрет перехода $0 \rightarrow 0'$.

В классической физике тензорное произведение двух векторных величин a^α и b^β в 3-мерном евклидовом пространстве можно представить в виде суммы по тензорам,

$$a^\alpha b^\beta = \frac{1}{6} \delta^{\alpha\beta} (\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}) + \frac{1}{2} \epsilon_{\alpha\beta\gamma} (\mathbf{a} \times \mathbf{b})^\gamma + \frac{1}{2} \left\{ a^\alpha b^\beta + a^\beta b^\alpha - \frac{1}{3} \delta^{\alpha\beta} (\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}) \right\}, \quad (2.1)$$

которые преобразуются при вращении координат системы независимо друг от друга, т.е. только через свои собственные компоненты, так что эти компоненты уже не раскладываются на независимые, а значит, как говорят в математике, тензорное произведение векторов раскладывается в прямую сумму неприводимых тензоров. В самом деле, во-первых, скалярное произведение является инвариантом, а тензор Кронекера, или евклидова метрика — также инвариант вращений, т.е. не зависит от системы координат. Поэтому первый вклад удовлетворяет указанному свойству неприводимости. Во-вторых, псевдовектор векторного произведения также преобразуется при вращениях только через свои компоненты: он неприводим. В-третьих, след тензора — инвариант, поэтому бесследовый симметричный тензор сохраняет нулевое значение следа также, как и симметричность: он независим. Однако, разбиение на независимые тензоры — это достаточное, но не необходимое условие неприводимости, так как оно еще не означает, что каждый из них уже невозможно далее также разложить на независимые, т.е. инвариантные, подпространства. В группе вращений путеводной нитью построения неприводимых тензоров является наличие единственного инварианта — квадрата векторного генератора вращений \mathbf{j}^2 , а также базиса состояний с определенной проекцией j_z , элементы которого переходят друг в друга под действием операторов j_\pm , так что в этом пространстве нет инвариантных подпространств: только тензорные величины, имеющие определенное значение \mathbf{j}^2 , являются неприводимыми! В разложении (2.1) мы записали сумму скаляра (спин 0), вектора (спин 1) и тензора (спин 2).

В квантовой механике преобразование эрмитовых операторов, сопоставленных векторным или тензорным наблюдаемым, с одной стороны, в точности соответствует классическим преобразованиям, а с другой, задается действием операторов вращения

$$\hat{R} A^\alpha \hat{R}^\dagger = \mathcal{R}_\beta^\alpha A^\beta,$$

где \mathcal{R} — матрица вращения операторов координат. В инфинитезимальном виде

$$\hat{R} \approx \mathbb{1} + i(\mathbf{s} \cdot \boldsymbol{\phi}),$$

где оператор \mathbf{s} берется в представлении, отвечающем оператору A^α . Это справедливо и при рассмотрении действия оператора вращений на состояния с определенным значением спина и орбитального момента. Уже в этом случае возникает задача определения суммарного значения $\mathbf{j} = \mathbf{l} + \mathbf{s}$.

Для произведения операторов $A^\alpha B^\beta$ оператор бесконечно малых поворотов —

$$\hat{R} = \mathbb{1} + i(\mathbf{s}_A + \mathbf{s}_B) \cdot \boldsymbol{\phi}.$$

Но разложение произведения тензорных величин в сумму неприводимых тензоров означает, что эти неприводимые тензоры преобразуются как величины с соответствующим значением квадрата спина \mathbf{s}_{AB} . Поэтому встает задача нахождения суммы

$$\mathbf{s}_A + \mathbf{s}_B = \mathbf{s}_{AB}.$$

С точки зрения состояний, достаточно задать действие суммы моментов на состояния с заданным моментом, так что для произведения тензорных операторов всегда можно вычислить матричные элементы по этим состояниям.

2.1. Сложение двух моментов: базис состояний

Пусть заданы моменты \mathbf{j}^A и \mathbf{j}^B , которые действуют в пространстве базисных состояний $|j^A, m_A\rangle$ и $|j^B, m_B\rangle$. Сумма моментов, как мы видели, является генератором вращений в пространстве тензорного произведения состояний

$$|j^A, m_A\rangle \otimes |j^B, m_B\rangle \equiv |j^A, m_A\rangle |j^B, m_B\rangle,$$

где мы упускаем знак тензорного произведения для краткости записи. В этом пространстве можно выбрать базис так, чтобы оператор¹

$$\mathbf{J} = \mathbf{j}^A + \mathbf{j}^B$$

имел на базисных векторах определенные значения своего квадрата и проекции на ось z :

$$\mathbf{J}^2 |J, M\rangle = J(J+1) |J, M\rangle, \quad J_3 |J, M\rangle = M |J, M\rangle.$$

Заметим теперь, что

$$J_3 |j^A, m_A\rangle |j^B, m_B\rangle = (j_3^A + j_3^B) |j^A, m_A\rangle |j^B, m_B\rangle = (m_A + m_B) |j^A, m_A\rangle |j^B, m_B\rangle,$$

т.е.

$$J_3 |j^A, m_A\rangle |j^B, m_B\rangle = M |j^A, m_A\rangle |j^B, m_B\rangle, \quad M = m_A + m_B. \quad (2.2)$$

Значит, состояния произведения являются состояниями с заданной проекцией суммарного момента.

¹Тривиальное, но важное замечание состоит в том, что оператор суммарного момента имеет те же коммутационные соотношения, что его составляющие, которые, по построению, взаимно коммутируют.

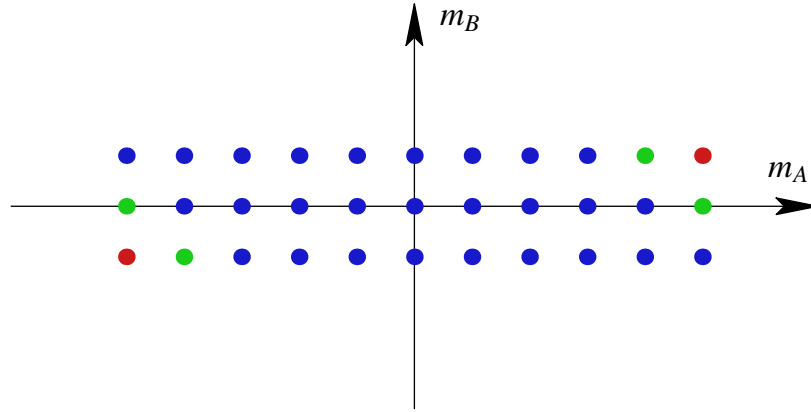


Рис. 2.1: Диаграмма допустимых значений проекций суммарного момента M на плоскости (m_A, m_B) .

Найдем, сколько состояний исходной системы отвечают заданной величине M и какова область ее допустимых значений. Для этого рассмотрим диаграмму на рис. 2.1. Легко заметить, что M принимает значения в области

$$-j^A - j^B \leq M \leq j^A + j^B, \quad (2.3)$$

с шагом $\Delta M = 1$.

Пусть для определенности $j^A \geq j^B$. Тогда согласно диаграмме кратность вырождения M по m_A и m_B в исходном базисе зависит от значения M . Так, кратность $k(M)$ остается постоянной при

$$-j^A + j^B \leq M \leq j^A - j^B, \quad k(M) = 2j^B + 1, \quad (2.4)$$

т.е. кратность определяется числом базисных векторов для меньшего из двух моментов.

В других случаях

$$\begin{aligned} |M| &= j^A + j^B, & k(M) &= 1, \\ |M| &= j^A + j^B - 1, & k(M) &= 2, \\ &\vdots \\ |M| &= j^A - j^B + 1, & k(M) &= 2j^B, \end{aligned} \quad (2.5)$$

или

$$k(M) = j^A + j^B + 1 - |M|, \quad j^A - j^B + 1 \leq |M| \leq j^A + j^B. \quad (2.6)$$

Для старшего вектора

$$J_+ |j^A, j^A\rangle |j^B, j^B\rangle = (j_+^A + j_+^B) |j^A, j^A\rangle |j^B, j^B\rangle = 0.$$

Отсюда заключаем, что это собственный вектор состояния $|J, J\rangle$ с моментом $J = j^A + j^B$, т.е.

$$|j^A, j^A\rangle |j^B, j^B\rangle = |j^A + j^B, j^A + j^B\rangle. \quad (2.7)$$

Поскольку

$$J_{\pm} = j_{\pm}^A + j_{\pm}^B,$$

действие этих операторов на исходные состояния $|j^A, m_A\rangle |j^B, m_B\rangle$ дает состояния из того же пространства. Поэтому в силу

$$J_- |J, J\rangle = \sqrt{J(J+1) - J(J-1)} |J, J-1\rangle = \sqrt{2J} |J, J-1\rangle$$

состояние

$$J_- |j^A + j^B, j^A + j^B\rangle = \sqrt{2(j^A + j^B)} |j^A + j^B, j^A + j^B - 1\rangle$$

сводится к

$$\begin{aligned} (j_-^A + j_-^B) |j^A, j^A\rangle |j^B, j^B\rangle &= \sqrt{j^A(j^A+1) - j^A(j^A-1)} |j^A, j^A-1\rangle |j^B, j^B\rangle \\ &+ \sqrt{j^B(j^B+1) - j^B(j^B-1)} |j^A, j^A\rangle |j^B, j^B-1\rangle \\ &= \sqrt{2j^A} |j^A, j^A-1\rangle |j^B, j^B\rangle + \sqrt{2j^B} |j^A, j^A\rangle |j^B, j^B-1\rangle. \end{aligned}$$

Значит,

$$|j^A + j^B, j^A + j^B - 1\rangle = \sqrt{\frac{j^A}{j^A + j^B}} |j^A, j^A - 1\rangle |j^B, j^B\rangle + \sqrt{\frac{j^B}{j^A + j^B}} |j^A, j^A\rangle |j^B, j^B - 1\rangle. \quad (2.8)$$

Но в пространстве с $M = j^A + j^B - 1$ есть еще одно независимое состояние, которое можно выбрать ортогональным к $|j^A + j^B, j^A + j^B - 1\rangle$, например,

$$-\sqrt{\frac{j^B}{j^A + j^B}} |j^A, j^A - 1\rangle |j^B, j^B\rangle + \sqrt{\frac{j^A}{j^A + j^B}} |j^A, j^A\rangle |j^B, j^B - 1\rangle. \quad (2.9)$$

Действие на это состояние оператора J_+ переводит его либо в состояние с $M = j^A + j^B$, либо дает нуль. Первая возможность исключена, так как обратное действие понижающим оператором дало бы независимое ортогональное состояние, что невозможно. Действительно, если $|a\rangle$ — состояние с определенным значением момента, и $J_+|a\rangle \neq 0$, тогда $J_-J_+|a\rangle \sim |a\rangle$. Пусть $|b\rangle$ ортогонально $|a\rangle$, поэтому $\langle a|J_-J_+|b\rangle = 0$. Значит, состояния $J_+|b\rangle$ и $J_+|a\rangle$ ортогональны. В нашем случае, вектор состояния, получающийся действием повышающего оператора на (2.9), ортогонален единственному состоянию с максимальным значением проекции суммарного момента, значит, повышение (2.9) дает тождественный нуль. Поэтому заключаем, что состояние (2.9) есть старший вектор с моментом $J = j^A + j^B - 1$.

Эта процедура может быть продолжена рекуррентно вплоть до $M = j^A - j^B$. Итак, при $M = j^A - j^B$ мы имеем $2j^B + 1$ состояний, которые отвечают базису состояний с суммарным моментом $J = \{j^A + j^B, j^A + j^B - 1, \dots, j^A - j^B\}$. Последующее действие понижающим оператором, во-первых, оставляет состояния в исходном пространстве и, во-вторых, не приводит к увеличению независимых состояний. В итоге, указанные нами значения суммарного момента полностью исчерпывают его допустимые значения. Таким образом, сложение моментов j^A и j^B приводит к суммарному моменту, который принимает значения

$$J = j^A + j^B, j^A + j^B - 1, \dots, |j^A - j^B|. \quad (2.10)$$

Этот вывод допускает простую наглядную интерпретацию: *максимальная длина суммы векторов достигается, когда они параллельны, а минимальная, когда они антипараллельны.*

Преобразование базиса от $|j^A, m_A\rangle |j^B, m_B\rangle$ к $|J, M\rangle$ сохраняет нормировку состояний и является линейным. Это — унитарное преобразование

$$|J, M\rangle = \sum_{m_A, m_B} |j^A, m_A\rangle |j^B, m_B\rangle C_{j^A, m_A; j^B, m_B}^{JM}, \quad (2.11)$$

где амплитуды

$$C_{j^A, m_A; j^B, m_B}^{JM} = \langle j^A, m_A; j^B, m_B | J, M \rangle \quad (2.12)$$

носят название коэффициентов Клебша–Гордана, и они приводятся в таблицах для практически применяемых значений моментов. Чтобы избавиться от произвольных фазовых множителей, полагают, что число

$$C_{j^A, j^A; j^B, j^A-J}^{JJ} > 0,$$

т.е. значение заданного коэффициента разложения является положительным числом. Тогда по построению (понижающие операторы) все коэффициенты Клебша–Гордана — вещественные числа.

В силу ортогональности

$$\langle J', M' | J, M \rangle = \delta_{JJ'} \delta_{MM'},$$

находим

$$\sum_{m_A, m_B} C_{j^A, m_A; j^B, m_B}^{J'M'} C_{j^A, m_A; j^B, m_B}^{JM} = \delta_{JJ'} \delta_{MM'}. \quad (2.13)$$

В силу полноты базиса в подпространстве

$$\sum_{J=|j^A-j^B|}^{J=j^A+j^B} \sum_{M=-J}^{M=J} |J, M\rangle \langle J, M| = \mathbb{1},$$

и ортогональности исходного базиса состояний, получим

$$\sum_{J=|j^A-j^B|}^{J=j^A+j^B} \sum_{M=-J}^{M=J} C_{j^A, m_A; j^B, m_B}^{JM} C_{j^A, m'_A; j^B, m'_B}^{JM} = \delta_{m_A m'_A} \delta_{m_B m'_B}. \quad (2.14)$$

Число состояний. В исходном базисе было $(2j^A + 1)(2j^B + 1)$ ортонормированных состояний. В разложении этих состояний по базису с определенными значениями суммарного момента и его проекций мы получаем, соответственно,

$$2(j^A + j^B) + 1, 2(j^A + j^B) - 1, \dots, 2(j^A - j^B) + 1,$$

состояний. Суммируя члены арифметической прогрессии², находим

$$\frac{1}{2} \{2(j^A + j^B) + 1 + 2(j^A - j^B) + 1\} (2j^B + 1) = (2j^A + 1)(2j^B + 1),$$

т.е. то же число базисных состояний, как этого и следовало ожидать.

Задача 2. Провести сложение моментов $j^A = 1$ и $j^B = 1/2$.

² «Первый плюс последний на число членов пополам».

Решение. Состояние $|1, 1\rangle|+\rangle$ дает старший вектор с моментом $3/2$

$$|\frac{3}{2}, \frac{3}{2}\rangle = |1, 1\rangle|+\rangle.$$

Понижающий оператор дает, с одной стороны,

$$J_- |\frac{3}{2}, \frac{3}{2}\rangle = \sqrt{3} |\frac{3}{2}, \frac{1}{2}\rangle,$$

а с другой

$$(j_-^A + j_-^B) |1, 1\rangle|+\rangle = \sqrt{2} |1, 0\rangle|+\rangle + |1, 1\rangle|-\rangle.$$

Значит,

$$|\frac{3}{2}, \frac{1}{2}\rangle = \sqrt{\frac{2}{3}} |1, 0\rangle|+\rangle + \sqrt{\frac{1}{3}} |1, 1\rangle|-\rangle.$$

Ортогональный ему вектор —

$$|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle = -\sqrt{\frac{1}{3}} |1, 0\rangle|+\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}} |1, 1\rangle|-\rangle.$$

Действие понижающим оператором дает, во-первых,

$$J_- |\frac{3}{2}, \frac{1}{2}\rangle = 2 |\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}\rangle,$$

и

$$(j_-^A + j_-^B) |1, 0\rangle|+\rangle = \sqrt{2} |1, -1\rangle|+\rangle + |1, 0\rangle|-\rangle, \quad (j_-^A + j_-^B) |1, 1\rangle|-\rangle = \sqrt{2} |1, 0\rangle|-\rangle,$$

откуда

$$|\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}\rangle = \sqrt{\frac{1}{3}} |1, -1\rangle|+\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}} |1, 0\rangle|-\rangle.$$

Во-вторых, аналогично

$$|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle = -\sqrt{\frac{2}{3}} |1, -1\rangle|+\rangle + \sqrt{\frac{1}{3}} |1, 0\rangle|-\rangle.$$

Наконец, очевидно, младший вектор —

$$|\frac{3}{2}, -\frac{3}{2}\rangle = |1, -1\rangle|-\rangle.$$

Итак, мы построили базис ортонормированных состояний с суммарным спином $3/2$ и $1/2$. ■

2.2. Тензорные операторы: правила отбора

Тензорный оператор

$$\hat{T}_m^{(j)} = |j, m\rangle \tilde{T} \langle 0, 0| \quad (2.15)$$

переводит скалярное состояние в состояние с заданным моментом j и его проекцией m . По построению — это неприводимый тензорный оператор. При вращениях он преобразуется как кет- и бра-вектора, т.е. согласно

$$\hat{R} \hat{T}_m^{(j)} \hat{R}^\dagger = \mathcal{R}_{mm'}^{(j)} \hat{T}_{m'}^{(j)}, \quad (2.16)$$

где \mathcal{R} — матрица вращения состояний с моментом j , и мы подразумеваем суммирование по повторяющемуся индексу m' . Отсюда видно, что \tilde{T} не может зависеть от m , так как иначе вид преобразований при вращениях не соответствовал бы состоянию с заданным значением момента, что есть частный случай теоремы Вигнера–Эккарта, примененной для данного оператора.

Коммутаторы тензорного оператора с моментом легко вычисляются по известному результату действия компонент момента на кет- и бра-состояния:

$$\begin{aligned} [j_3, \hat{T}_m^{(j)}] &= m \hat{T}_m^{(j)}, \\ [j_{\pm}, \hat{T}_m^{(j)}] &= \sqrt{j(j+1) - m(m \pm 1)} \hat{T}_{m \pm 1}^{(j)}. \end{aligned} \quad (2.17)$$

Соотношения (2.16) и (2.17) – закон преобразования и следующие из него коммутационные соотношения – представляют собой самое общее определение для неприводимых тензорных величин. Обобщая (2.15), можно записать неприводимый тензор порядка j с компонентой m , который действует на состояния произвольного момента импульса, в виде

$$T_m^{(j)} = \sum_{J,M} |J, M; j, m\rangle \tilde{T}_J \langle J, M|. \quad (2.18)$$

Закон его преобразования при вращениях

$$\hat{R} \hat{T}_m^{(j)} \hat{R}^\dagger = \mathcal{R}_{mm'}^{(j)} \sum_{J,M} \mathcal{R}_{MM'}^{(J)} \mathcal{R}_{MM''}^{*(J)} |J, M'; j, m'\rangle \tilde{T}_J \langle J, M''|.$$

Но матрица вращений состояний является унитарной

$$\left(\{ \mathcal{R}^{(J)} \}^\dagger \mathcal{R}^{(J)} \right)_{M'M''} = \mathcal{R}_{MM''}^{*(J)} \mathcal{R}_{MM'}^{(J)} = \delta_{M'M''},$$

и мы получаем в точности

$$\hat{R} \hat{T}_m^{(j)} \hat{R}^\dagger = \mathcal{R}_{mm'}^{(j)} \hat{T}_{m'}^{(j)}. \quad (2.16)$$

При этом существенно, что *величина \tilde{T}_J не зависит от проекций моментов*. Доказательство коммутационных соотношений (2.17) также не вызывает никаких затруднений³. Итак, выражение (2.18) определяет самый общий вид неприводимого тензорного оператора⁴ порядка j с проекцией m (это представление обычно называют стандартным).

Теорема Вигнера–Эккарта. Матричный элемент неприводимого тензорного оператора $T_m^{(j)}$ порядка j с проекцией m по состояниям с заданными значениями момента выражается через коэффициенты Клебша–Гордана в виде

$$\langle J, M | T_m^{(j)} | J', M' \rangle = \frac{\langle J || T^{(j)} || J' \rangle}{\sqrt{2J+1}} \langle J, M | J', M'; j, m \rangle, \quad (2.19)$$

где $\langle J || T^{(j)} || J' \rangle$ — приведенный матричный элемент оператора, который зависит только от J и J' , но не зависит от проекций моментов. Здесь фактор $1/\sqrt{2J+1}$ введен согласно общепринятому соглашению для удобства при вычислениях.

Мы по существу доказали эту теорему явным построением неприводимых тензорных операторов общего вида⁵, затем определив их трансформационные свойства. Обычно поступают наоборот, постулируют закон преобразования величин при вращениях и отсюда получают общий вид оператора, т.е. его матричный элемент, отвечающий теореме.

³Для повышающего и понижающего операторов нужно провести подходящую замену переменной суммирования $M \mapsto M \mp 1$.

⁴Мы здесь опустили в бра- и кет-векторах обозначения для других возможных квантовых чисел, остающихся неизменными при вращениях (для скаляров).

⁵Обозначим $\tilde{T}_{J'} = \langle J || T^{(j)} || J' \rangle / \sqrt{2J+1}$.

Пример. Сферические гармоники можно представить как матричный элемент неприводимого тензорного оператора вида (2.15):

$$Y_{l,m}(\theta, \phi) = \langle \mathbf{r} | l, m \rangle \langle 0, 0 | 0, 0 \rangle.$$

Значит, эти гармоники — стандартное представление для неприводимых тензоров порядка l . Для $l = 1$ легко найти

$$Y_{1,\alpha} = -\sqrt{\frac{3}{4\pi}} n_\alpha, \quad \mathbf{n} = \frac{\mathbf{r}}{r},$$

причем

$$n_\pm = \pm \frac{1}{\sqrt{2}} (n_1 \pm i n_2),$$

что отвечает принятому соглашению о фазах: $Y_{l,m}^* = (-1)^m Y_{l,-m}$.

Для $l = 2$

$$\tilde{Y}_{2,\alpha\beta} = \sqrt{\frac{5}{6\pi}} \frac{1}{2} \{3 n_\alpha n_\beta - \delta_{\alpha\beta}\},$$

так что стандартное представление получается согласно

$$Y_{2,2} = \tilde{Y}_{2,++}, \quad Y_{2,-2} = \tilde{Y}_{2,--},$$

$$Y_{2,1} = \frac{1}{\sqrt{2}} \{\tilde{Y}_{2,+3} + \tilde{Y}_{2,3+}\} = \sqrt{2} \tilde{Y}_{2,+3}, \quad Y_{2,-1} = \sqrt{2} \tilde{Y}_{2,-3},$$

$$Y_{2,0} = \frac{1}{\sqrt{6}} \{\tilde{Y}_{2,+-} + \tilde{Y}_{2,-+} + 2 \tilde{Y}_{2,33}\} = \sqrt{\frac{3}{2}} \tilde{Y}_{2,33}.$$

Здесь мы учли, что

$$\mathbf{n}^2 = n^\alpha n^\beta \delta_{\alpha\beta} = -n_+ n_- - n_- n_+ + n_3 n_3,$$

откуда следует, что $\delta_{\alpha\beta}$ имеет диагональный вид с

$$\delta_{+-} = \delta_{-+} = -\delta_{33} = -1.$$

Приведенные формулы для стандартного вида сферических гармоник полезно сравнить с результатом суммирования двух моментов $j = 1$, которые дают тензор $j = 2$:

$$|2, 2\rangle = |1, +1\rangle |1, +1\rangle, \quad |2, -2\rangle = |1, -1\rangle |1, -1\rangle,$$

$$|2, 1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \{|1, +1\rangle |1, 0\rangle + |1, 0\rangle |1, +1\rangle\},$$

$$|2, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}} \{|1, +1\rangle |1, -1\rangle + |1, -1\rangle |1, +1\rangle + 2 |1, 0\rangle |1, 0\rangle\},$$

что в точности совпадает с выражениями через функции \tilde{Y} при очевидном соответствии состояний момента и компонент \tilde{Y} .

Правила отбора. Коэффициенты Клебша–Гордана принимают ненулевые значения, только если моменты и их проекции при сложении пробегают допустимую область своего изменения. Поэтому и матричные элементы неприводимых тензорных операторов, пропорциональные, как мы убедились согласно теореме Вигнера–Эккарта, коэффициентам Клебша–Гордана, отличны от нуля, если, во-первых,

$$M' = M + m, \quad m \in \{-j, -j+1, \dots, j-1, j\}.$$

Значит для оператора ранга j с произвольной допустимой проекцией имеет место, как говорят, правило отбора по проекции момента

$$|\Delta M| \leq j. \quad (2.20)$$

В противном случае, матричные элементы этого оператора заведомо равны нулю.

Во-вторых, так как

$$|J - j| \leq J' \leq J + j,$$

правило отбора по модулю момента принимает вид

$$|\Delta J| \leq j, \quad j \leq J + J'. \quad (2.21)$$

Как следствие, получаем **правило запрета**: если $j \neq 0$, то матричные элементы с $J = J' = 0$ тождественно равны нулю, или, как говорят, переход $0 \rightarrow 0'$ запрещен.

Тема 3

Релятивистская квантовая механика: поле и вторичное квантование

Лекция № 3

Генераторы вращений, их коммутатор, спин векторной частицы, полный момент количества движения, генераторы бустов и полная алгебра группы Лоренца, собственные ортохронные преобразования, дискретные операции инверсии пространства и времени, классификация преобразований полной группы Лоренца, базис полей и группа $SL(2, \mathbb{C})$, релятивистские спиноры, индексы с точкой и без точки.

Квантовая механика релятивистских частиц строится в 4-мерном пространстве-времени Минковского, которое обладает симметриями — преобразованиями координат, оставляющими инвариантными метрику, т.е. интервал

$$ds^2 = c^2 dt^2 - d\mathbf{r}^2.$$

Соответствующая группа преобразований включает в себя зависящие от непрерывных параметров трансляции, вращения и бусты (переходы от одних инерциальных систем к другим), а также дискретные преобразования зеркального отражения пространства, обращения стрелы времени и зарядового (комплексного) сопряжения.

3.1. Вращения

Бесконечно малые вращения координат 3-мерного евклидова пространства вокруг оси, направленной вдоль единичного вектора \mathbf{e} , на угол $\phi \rightarrow 0$ в декартовой системе координат задаются векторным произведением

$$\delta \mathbf{r} = [\boldsymbol{\phi}, \mathbf{r}],$$

где псевдовектор поворота —

$$\boldsymbol{\phi} = \phi \mathbf{e}.$$

Преобразованные координаты можно записать покомпонентно

$$r'_\alpha = (\mathbf{r} + \delta \mathbf{r})_\alpha = (\delta_{\alpha\gamma} + \epsilon_{\alpha\beta\gamma} \phi_\beta) r_\gamma,$$

или в матричном, операторном, виде¹

$$\mathbf{r}' = (\mathbb{1} - i \mathbf{s} \cdot \boldsymbol{\phi}) \mathbf{r}, \quad (3.1)$$

¹Напомним, что как было показано в первой части курса лекции (см. лекцию № 7), преобразование квантовых величин — операторов координат — и классических величин являются взаимно обратными, так что отсюда: если преобразования базиса $A|\mathbf{r}\rangle = |\mathcal{A}\mathbf{r}\rangle$, где \mathcal{A} — матрица преобразований координат в классике, то для операторов координат $\hat{\mathbf{r}}' = \hat{A} \hat{\mathbf{r}} \hat{A}^{-1} = \mathcal{A}^{-1} \hat{\mathbf{r}}$. В принятых в этой лекции обозначениях заданы бесконечно малые преобразования классических координат, т.е. матрицы \mathcal{A} для базиса («пассивная» картина преобразований). Переход к «активной» картине преобразований получается простой заменой параметров на обратные, в частности, для поворотов $\boldsymbol{\phi} \rightarrow -\boldsymbol{\phi}$, или, что то же, заменой знаков перед генераторами преобразований.

причем компоненты матрицы \mathbf{s} , очевидно, задаются явно как

$$(\mathbf{s}_\beta)_{\alpha\gamma} = -i\epsilon_{\beta\alpha\gamma}. \quad (3.2)$$

Эти матрицы эрмитовы.

Коммутационные соотношения для этих матриц

$$[\mathbf{s}_\alpha, \mathbf{s}_\beta] = i\epsilon_{\alpha\beta\gamma} \mathbf{s}_\gamma, \quad (3.3)$$

легко установить прямым вычислением коммутатора матриц: слева в (3.3) имеем

$$\begin{aligned} [\mathbf{s}_\alpha, \mathbf{s}_\beta]_{\mu\nu} &= (-i)^2 \{ \epsilon_{\alpha\mu\rho} \epsilon_{\beta\rho\nu} - \epsilon_{\beta\mu\rho} \epsilon_{\alpha\rho\nu} \} = \epsilon_{\alpha\mu\rho} \epsilon_{\beta\rho\nu} - \epsilon_{\beta\mu\rho} \epsilon_{\alpha\rho\nu} \\ &= \delta_{\alpha\beta} \delta_{\mu\nu} - \delta_{\alpha\nu} \delta_{\beta\mu} - \delta_{\alpha\beta} \delta_{\mu\nu} + \delta_{\alpha\mu} \delta_{\beta\nu} = \delta_{\alpha\mu} \delta_{\beta\nu} - \delta_{\alpha\nu} \delta_{\beta\mu}; \end{aligned}$$

в то время как с правой стороны получаем

$$i(-i)\epsilon_{\alpha\beta\gamma} \epsilon_{\gamma\mu\nu} = \delta_{\alpha\mu} \delta_{\beta\nu} - \delta_{\alpha\nu} \delta_{\beta\mu};$$

т.е. имеет место тождество. Кроме того квадрат вектора \mathbf{s} в матричной форме —

$$(\mathbf{s} \cdot \mathbf{s})_{\mu\nu} = -\epsilon_{\alpha\mu\rho} \epsilon_{\alpha\rho\nu} = \epsilon_{\alpha\rho\mu} \epsilon_{\alpha\rho\nu} = 2\delta_{\mu\nu},$$

а значит, он пропорционален единичной матрице, и

$$\mathbf{s} \cdot \mathbf{s} = 2.$$

Очевидно, что скалярная величина не изменяется при вращениях:

$$[\mathbf{s}^2, \mathbf{s}_\alpha] = 0. \quad (3.4)$$

Произвольный вектор, не зависящий от координат, преобразуется при малых вращениях по тому же закону, что и сами координаты:

$$\mathbf{A}' = (1 - i\mathbf{s} \cdot \boldsymbol{\phi}) \mathbf{A}. \quad (3.5)$$

Согласно коммутационным соотношениям для вектора \mathbf{s} (3.3) и (3.4) в векторном пространстве можно выбрать базис из собственных векторов матриц \mathbf{s}_z и \mathbf{s}^2 . Собственные векторы матрицы

$$[(\mathbf{s}_z)_{\alpha\beta}] = -i\epsilon_{3\alpha\beta} = -i \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

легко найти: собственным значениям $\lambda = \pm 1$ и $\lambda = 0$ (матрица эрмитова) соответствуют ортонормированные векторы

$$\mathbf{e}_+ = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{e}_- = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{e}_0 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (3.6)$$

так что

$$\mathbf{A} = A_- \mathbf{e}_+ + A_+ \mathbf{e}_- + A_0 \mathbf{e}_0,$$

где связь с компонентами в исходном базисе декартовых координат, очевидно,

$$A_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2}}\{A_x \pm iA_y\}, \quad A_0 = A_z.$$

Вектор, зависящий от координат, называется векторным полем. Для него инфинитезимальные преобразования записываются в том же виде

$$\mathbf{A}'(\mathbf{r}') = (\mathbb{1} - i \mathbf{s} \cdot \boldsymbol{\phi}) \mathbf{A}(\mathbf{r}). \quad (3.7)$$

Поскольку для малых смещений координат

$$\mathbf{A}'(\mathbf{r}') = \mathbf{A}'(\mathbf{r}) + \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial x_{\alpha}} \delta x^{\alpha} \equiv \mathbf{A}'(\mathbf{r}) + \delta x^{\alpha} \partial_{\alpha} \mathbf{A}(\mathbf{r}),$$

где мы опустили «штрих» во втором слагаемом, в силу того, что это приводит к поправкам второго порядка малости по углу поворота. Затем необходимо подставить вращения $\delta x^{\alpha} = \hat{\epsilon}^{0\alpha\beta\gamma} \phi_{\beta} x_{\gamma}$, где мы перешли к релятивистским тензорным, индексным, обозначениям, так что $\phi_{\beta} = -\phi^{\beta}$, $x_{\gamma} = -x^{\gamma}$, а $\hat{\epsilon}^{mnkl}$ — полностью антисимметричный тензор Леви-Чивита с нормировкой $\hat{\epsilon}^{0123} = 1$. Тогда с учетом антисимметрии символа $\hat{\epsilon}^{mnkl}$

$$\mathbf{A}'(\mathbf{r}') = \mathbf{A}'(\mathbf{r}) + \frac{1}{2} \hat{\epsilon}^{0\alpha\beta\gamma} \phi_{\beta} \{x_{\gamma} \partial_{\alpha} - x_{\alpha} \partial_{\gamma}\} \mathbf{A}(\mathbf{r}),$$

или

$$\mathbf{A}'(\mathbf{r}') = \mathbf{A}'(\mathbf{r}) + i \mathbf{l} \cdot \boldsymbol{\phi} \mathbf{A}(\mathbf{r}), \quad (3.8)$$

так что с учетом $\mathbf{l} \cdot \boldsymbol{\phi} = -l^{\alpha} \phi_{\alpha}$

$$l^{\alpha} = \frac{i}{2} \hat{\epsilon}^{0\alpha\beta\gamma} \{x_{\beta} \partial_{\gamma} - x_{\gamma} \partial_{\beta}\} = \frac{1}{\hbar} (\mathbf{x} \times \mathbf{p}) = \frac{1}{\hbar} \mathbf{L}, \quad (3.9)$$

где мы приняли во внимание релятивистские обозначения для верхних и нижних индексов: $x_{\beta} = -x^{\beta}$ и $-i\partial_{\gamma} = -i\nabla_{\gamma} = \mathbf{p}^{\gamma}/\hbar$, откуда $\mathbf{L} = \mathbf{x} \times \mathbf{p}$ — оператор орбитального момента (мы использовали $(\bullet \times \bullet\bullet)$ для обозначения векторного произведения, чтобы не путать его с коммутатором $[\bullet, \bullet\bullet]$).

Тогда согласно (3.7) и (3.8) преобразование функции поля в заданной точке

$$\mathbf{A}'(\mathbf{r}) = (\mathbb{1} - i (\mathbf{l} + \mathbf{s}) \cdot \boldsymbol{\phi}) \mathbf{A}(\mathbf{r}), \quad (3.10)$$

и следовательно можно ввести оператор

$$\mathbf{j} = \mathbf{l} + \mathbf{s}, \quad (3.11)$$

или

$$\mathbf{J} = \hbar \mathbf{j}.$$

Этот оператор называют полным моментом импульса поля, который составлен из суммы оператора орбитального момента \mathbf{L} и спина векторного поля $\mathbf{S} = \hbar \mathbf{s}$. Полный момент имеет те же коммутационные соотношения, что и составляющие его коммутирующие между собой слагаемые:

$$[\mathbf{j}^{\alpha}, \mathbf{j}^{\beta}] = i \hat{\epsilon}^{0\alpha\beta\gamma} \mathbf{j}^{\gamma}, \quad [\mathbf{j}^2, \mathbf{j}^{\alpha}] = 0, \quad (3.12)$$

т.е. генераторы вращений на векторных полях образуют алгебру группы SU(2).

В релятивистских обозначениях вводят тензорный оператор

$$L_{\alpha\beta} = i\hbar\{x_\alpha\partial_\beta - x_\beta\partial_\alpha\} = \{x_\alpha p_\beta - x_\beta p_\alpha\}, \quad p_\alpha \equiv i\hbar\partial_\alpha, \quad (3.13)$$

так что

$$\mathbf{l} \cdot \boldsymbol{\phi} = -l^\gamma \phi_\gamma = -\frac{1}{2\hbar} L_{\alpha\beta} \hat{\epsilon}^{0\alpha\beta\gamma} \phi_\gamma = \frac{1}{2\hbar} L_{\alpha\beta} \omega^{\alpha\beta},$$

где тензор углов вращений

$$\omega^{\alpha\beta} = -\hat{\epsilon}^{0\alpha\beta\gamma} \phi_\gamma = \hat{\epsilon}^{0\alpha\beta\gamma} \phi_\gamma. \quad (3.14)$$

В этих обозначениях при бесконечно малых вращении координаты преобразуются согласно

$$x'^\alpha = x^\alpha + \omega^{\alpha\beta} x_\beta, \quad \omega^{\alpha\beta} = -\omega^{\beta\alpha}.$$

Откуда следует, что с необходимой точность первого порядка по ω

$$x'^\alpha x'_\alpha = x^\alpha x_\alpha + 2\omega^{\alpha\beta} x_\alpha x_\beta = x^\alpha x_\alpha,$$

т.е. сохраняется релятивистская мера – интервал, как это и должно быть.

Тогда и спиновую часть момента можно преобразовать, если записать

$$\delta A^\beta = -i(\mathbf{s})^{\beta\gamma} \cdot \boldsymbol{\phi} A^\gamma = i(\mathbf{s})^{\beta\gamma} \cdot \boldsymbol{\phi} A_\gamma$$

и

$$(\mathbf{s})^{\beta\gamma} \cdot \boldsymbol{\phi} = -i\hat{\epsilon}^{0\alpha\beta\gamma}(-\phi_\alpha) = -i\omega^{\beta\gamma} = -\frac{i}{2} \{\delta_\mu^\beta \delta_\nu^\gamma - \delta_\nu^\beta \delta_\mu^\gamma\} \omega^{\mu\nu}.$$

Введение спинового матричного тензора векторного поля

$$S_{\mu\nu}^{\beta\gamma} = i\hbar \{\delta_\mu^\beta \delta_\nu^\gamma - \delta_\nu^\beta \delta_\mu^\gamma\} \quad (3.15)$$

позволяет записать оператор инфинитезимальных преобразований в векторном пространстве в виде

$$R(\omega) = \mathbb{1} - \frac{i}{2\hbar} \{L_{\mu\nu} + S_{\mu\nu}\} \omega^{\mu\nu}, \quad (3.16)$$

так что обычно вводят тензор момента

$$M_{\mu\nu} = L_{\mu\nu} + S_{\mu\nu}. \quad (3.17)$$

В этих обозначениях

$$\delta A^\beta(x) = -\frac{i}{2\hbar} \omega^{\mu\nu} (M_{\mu\nu})^{\beta\gamma} A_\gamma(x).$$

3.2. Бусты

Конечные преобразования Лоренца от одной инерциальной декартовой системы координат к другой – бусты – имеют вид

$$\begin{cases} x'_0 = x_0 \cosh \vartheta - (\mathbf{r} \cdot \mathbf{e}) \sinh \vartheta, \\ \mathbf{r}' = \mathbf{r} + \mathbf{e} \{(\mathbf{r} \cdot \mathbf{e})(\cosh \vartheta - 1) - x_0 \sinh \vartheta\}, \end{cases} \quad (3.18)$$

где \mathbf{e} — единичный вектор в направлении скорости движения штрихованной системы отсчета относительно начальной,

$$\mathbf{v} = \mathbf{e} v,$$

а модуль скорости связан с углом гипер-поворота ϑ

$$\frac{v}{c} = \tanh \vartheta.$$

Для бесконечно малых бустов, очевидно, разложение по ϑ дает

$$\begin{cases} x'_0 = x_0 - (\mathbf{r} \cdot \boldsymbol{\vartheta}), \\ \mathbf{r}' = \mathbf{r} - x_0 \boldsymbol{\vartheta}, \end{cases} \quad (3.19)$$

где мы ввели вектор гипер-поворота $\boldsymbol{\vartheta} = \mathbf{e} \vartheta$.

Это преобразование в индексных обозначениях имеет вид

$$x'^k = x^k + \{\delta_0^k \delta_\alpha^n - \delta_0^n \delta_\alpha^k\} \vartheta^\alpha x_n = x^k - i (\mathcal{K})^{kn} \cdot \boldsymbol{\vartheta} x_n, \quad (3.20)$$

где введены антисимметричные генераторы бустов в векторном пространстве

$$(\mathcal{K}^\alpha)^{kn} = i \{\delta_0^k \delta_\alpha^n - \delta_0^n \delta_\alpha^k\}, \quad (3.21)$$

или в контрвариантном виде

$$(\mathcal{K}_\alpha)^k{}_n = i \{\delta_0^k \delta_n^\alpha - g_{0n} g^{k\alpha}\}, \quad (3.22)$$

где $g_{mn} = \text{diag}\{1, -1, -1, -1\}$ — метрика пространства Минковского в декартовых координатах, а $g^{nk} = \text{diag}\{1, -1, -1, -1\}$ — обратная метрика: $g_{mn} g^{nk} = \delta_m^k$.

Если ввести антисимметричный тензор инфинитезимальных бустов

$$\omega^{0\alpha} = -\omega^{\alpha 0} = \vartheta^\alpha, \quad (3.23)$$

то

$$x'^k = x^k + \omega^{kn} x_n$$

или

$$x'^k = x^k - \frac{i}{2} \{(\mathcal{K}^\alpha)^{kn} \omega^{0\alpha} + (\mathcal{K}^\alpha)^{nk} \omega^{\alpha 0}\} x_n = x^k - \frac{i}{2\hbar} (S_{ml})^{kn} \omega^{ml} x_n,$$

где тензор генераторов бустов

$$S_{mn}^{kn} = i\hbar \{\delta_m^k \delta_l^n - \delta_m^n \delta_l^k\}. \quad (3.24)$$

В итоге, произвольное 4-векторное поле преобразуется при бустах согласно закону

$$A'^k(x') = \{\mathbb{1} - i(\mathcal{K} \cdot \boldsymbol{\vartheta})\}^{kn} A_n(x) = \{\mathbb{1} - \frac{i}{2\hbar} \omega^{ml} S_{ml}\}^{kn} A_n(x). \quad (3.25)$$

Разлагая x' , находим

$$\begin{aligned} A'^k(x') &= A'^k(x) + \delta x^n \partial_n A^k(x) = A'^k(x) - \frac{i}{2\hbar} (S_{ml})^{nq} \omega^{ml} x_q \partial_n A^k(x) \\ &= A'^k(x) + \frac{i}{2\hbar} \omega^{ml} (i\hbar) \{\delta_m^n \delta_l^q - \delta_m^q \delta_l^n\} x_n \partial_q A^k(x) \\ &= A'^k(x) + \frac{i}{2\hbar} \omega^{ml} (i\hbar) \{x_m \partial_l - x_l \partial_m\} A^k(x). \end{aligned}$$

В итоге,

$$A'^k(x) = \left\{ \mathbb{1} - \frac{i}{2\hbar} \omega^{ml} (L_{ml} + S_{ml}) \right\}^{kn} A_n(x), \quad (3.26)$$

и полный тензор момента для бустов равен сумме коммутирующих друг с другом пространственного и спинового вкладов

$$M_{ml} = L_{ml} + S_{ml}. \quad (3.27)$$

Коммутатор генераторов буста \mathcal{K} легко вычислить в матричном представлении для векторного пространства:

$$\begin{aligned} [\mathcal{K}^\alpha, \mathcal{K}^\beta]^k_n &= (\mathcal{K}^\alpha)^{km} (\mathcal{K}^\beta)_{mn} - (\mathcal{K}^\beta)^{km} (\mathcal{K}^\alpha)_{mn} \\ &= (-i)^2 \left(\{ \delta_0^k \delta_\alpha^m - \delta_0^m \delta_\alpha^k \} \{ g_{m0} g_{n\beta} - g_{n0} g_{m\beta} \} - \{ \delta_0^k \delta_\beta^m - \delta_0^m \delta_\beta^k \} \{ g_{m0} g_{n\alpha} - g_{n0} g_{m\alpha} \} \right) \\ &= \delta_\alpha^k g_{n\beta} - \delta_\beta^k g_{n\alpha} = i \hat{\epsilon}_{0\alpha\beta\gamma} (-i \epsilon^{0\gamma kn}) = -i \epsilon_{\alpha\beta\gamma} (s^\gamma)^{kn}. \end{aligned}$$

В итоге,

$$[\mathcal{K}^\alpha, \mathcal{K}^\beta] = -i \epsilon_{\alpha\beta\gamma} s^\gamma. \quad (3.28)$$

Совершенно аналогично можно показать, что для полных генераторов, включающих в себя пространственную и спиновую части,

$$\hbar \mathbf{K}^\alpha = L_{0\alpha} + S_{0\alpha} = L_{0\alpha} + \hbar \mathcal{K}^\alpha$$

и

$$\hbar \mathbf{j}^\alpha = \frac{1}{2} \hat{\epsilon}^{0\alpha\beta\gamma} (L_{\beta\gamma} + S_{\beta\gamma}) = \frac{1}{2} \epsilon_{\alpha\beta\gamma} L_{\beta\gamma} + \hbar s^\alpha = \hbar l^\alpha + \hbar s^\alpha$$

имеют место следующие коммутационные соотношения:

$$\begin{aligned} [j^\alpha, j^\beta] &= +i \epsilon_{\alpha\beta\gamma} j^\gamma, \\ [j^\alpha, K^\beta] &= +i \epsilon_{\alpha\beta\gamma} K^\gamma, \\ [K^\alpha, K^\beta] &= -i \epsilon_{\alpha\beta\gamma} j^\gamma. \end{aligned} \quad (3.29)$$

Эти коммутаторы можно легко вычислить, пользуясь операторным представлением для пространственных членов генераторов, т.е. полагая спиновые части равными нулю:

$$\mathbf{j} \mapsto -i(\mathbf{x} \times \nabla), \quad \mathbf{K} \mapsto i \left(ct \nabla + \frac{\mathbf{x}}{c} \partial_t \right).$$

Полученные коммутационные соотношения показывают, что генераторы бустов по своему закону преобразования при вращениях являются трехмерными векторами. Кроме того, коммутатор двух бустов по разным осям сводится, вообще говоря, к повороту.

3.3. Собственная ортохронная группа Лоренца

По построению генераторы вращений и бустов для 4-векторов можно объединить в антисимметричный тензор

$$J_{kn} = L_{kn} + S_{kn}, \quad L_{kn} = i\hbar (x_k \partial_n - x_n \partial_k), \quad S_{kn}^{ml} = i\hbar \left\{ \delta_k^m \delta_n^l - \delta_n^m \delta_k^l \right\}, \quad (3.30)$$

где уже индексы пробегают все возможные значения в пространстве Минковского, так что векторное поле инфинитезимально преобразуется согласно

$$A^m(x) = \left\{ \delta^{ml} - \frac{i}{2\hbar} J_{kn}^{ml} \omega^{kn} \right\} A_l(x). \quad (3.31)$$

Антисимметричный тензор параметров преобразований связан с углами поворота ϕ^γ и направлением малого буста ϑ^α

$$\omega^{\alpha\beta} = \epsilon_{\alpha\beta\gamma} \phi^\gamma, \quad \omega^{0\alpha} = \vartheta^\alpha.$$

Шестипараметрические преобразование координат —

$$x'^m = x^m + \omega^{ml} x_l, \quad \omega^{ml} = -\omega^{lm}.$$

Конечные элементы группы преобразований сохраняют интервал, так что при

$$dx'^m = \Lambda_n^m dx^n,$$

находим, что инвариантность

$$ds^2 = g_{mn} dx'^m dx'^n = g_{mn} \Lambda_p^m \Lambda_q^n dx^p dx^q = g_{pq} dx^p dx^q$$

в матричных обозначениях

$$\hat{g} = \Lambda^T \cdot \hat{g} \cdot \Lambda$$

имеет место при

$$(\det \Lambda)^2 = 1, \quad (3.32)$$

а также

$$g_{00} = 1 = g_{mn} \Lambda_0^m \Lambda_0^n = (\Lambda_0^0)^2 - (\Lambda_0^\alpha)^2. \quad (3.33)$$

Отсюда

$$|\Lambda_0^0| \geq 1. \quad (3.34)$$

Преобразования, включающие в себя исследованные нами бесконечно малые вращения и бусты вблизи тождественного преобразования, очевидно, имеют

$$\det \Lambda = 1, \quad \Lambda_0^0 \geq 1. \quad (3.35)$$

Такие преобразования не содержат инверсии пространства и не меняют стрелу времени, и поэтому они образуют соответственно собственную ортохронную группу Лоренца — $SO_+^\uparrow(3, 1)$.

Элементы группы могут быть записаны заданы в виде решений уравнений, задающих бесконечно малые преобразования. Например, для конечных бустов имеем

$$\Lambda(\vartheta) = \exp\{-i\mathcal{K} \cdot \vartheta\},$$

как решение уравнения с постоянной величиной $\mathcal{K} \cdot e$,

$$\frac{d\Lambda(\vartheta)}{d\vartheta} = -i\mathcal{K} \cdot e \Lambda(\vartheta), \quad e = \vartheta/\vartheta.$$

В координатах $\{x_0, \mathbf{e} \cdot \mathbf{r}, \mathbf{r}_\perp\}$ матрица $\mathcal{K} \cdot \mathbf{e}$ имеет блочный вид

$$-i\mathcal{K} \cdot \mathbf{e} = - \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = -\sigma_1 \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Поэтому, поперечные координаты, естественно, не преобразуются, а для временной компоненты и продольной получаем

$$\exp\{-i\mathcal{K} \cdot \boldsymbol{\vartheta}\} = \cosh \vartheta - \sigma_1 \sinh \vartheta = \begin{pmatrix} \cosh \vartheta & -\sinh \vartheta \\ -\sinh \vartheta & \cosh \vartheta \end{pmatrix}, \quad (3.36)$$

как и должно быть для преобразования буста с параметром $\beta = v/c = \tanh \vartheta$. Совершенно аналогично можно представить и конечные повороты вокруг произвольно направленной оси.

3.4. Дискретные преобразования

Несобственные ортохронные преобразования $SO_-^\uparrow(3, 1)$ с

$$\det \Lambda = -1, \quad \Lambda^0_0 \geq 1, \quad (3.37)$$

получаются из собственных ортохронных домножением на фактор отражения координат пространства $\mathbf{r} \rightarrow -\mathbf{r}$,

$$\mathcal{P} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (3.38)$$

Эти преобразования сохраняют метрику Минковского, но сами по себе, изолированно, не являются группой, так как последовательное действие пары несобственных преобразований является собственным.

Действие собственных антиортохронных преобразований $SO_+^\downarrow(3, 1)$ с

$$\det \Lambda = 1, \quad \Lambda^0_0 \leq -1, \quad (3.39)$$

связано с обращением стрелы времени $t \rightarrow -t$. Элементы этих преобразований строятся введением фактора

$$\mathcal{T} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (3.40)$$

в произведение элементов $SO_+^\uparrow(3, 1)$.

Преобразование вещественных тензорных полей под действием операций дискретных симметрий \mathcal{P} и \mathcal{T} строится в соответствии с обычными правилами преобразования тензоров: по каждому из векторных индексов проводится умножение на соответствующие матрицы, и при этом выделяются величины с положительной и отрицательной пространственной

четностью, а также с положительной и отрицательной четностью по отношению к обращению стрелы времени согласно стандартному правилу: величины с отрицательной четностью меняют знак при соответствующей инверсии.

Однако, генераторы инфинитезимальных преобразований группы Лоренца включают в себя мнимые единицы, т.е. комплексные факторы, а значит соответствуют комплекснозначным тензорным величинам. В этой связи в квантовой механике возникает дополнительный вопрос о том является ли оператор дискретной симметрии линейным – сохраняющим суперпозицию с заданными комплексными коэффициентами – или антилинейным, т.е. переводящим суперпозицию в суперпозицию с комплексно сопряженными коэффициентами. Проиллюстрируем этот вопрос на двух примерах. Так, с одной стороны, генератор пространственных вращений – орбитальный момент –

$$\mathbf{L} = -i\hbar (\mathbf{x} \times \nabla)$$

является в классической физике псевдовектором:

$$\mathbf{L} \xrightarrow{\mathcal{P}} \mathbf{L}.$$

Поэтому действие квантового оператора \mathbb{P} на

$$\mathbb{P} \mathbf{x} \mathbb{P}^{-1} = -\mathbf{x}, \quad \mathbb{P} \nabla \mathbb{P}^{-1} = -\nabla,$$

и на

$$\mathbb{P} \mathbf{L} \mathbb{P}^{-1} = \mathbf{L}$$

согласовано, если

$$\mathbb{P} i \mathbb{P}^{-1} = i,$$

оператор линейный.

С другой стороны, при обращении стрелы времени движение частицы заменяется на противоположное, так что «в классике»

$$\mathbf{L} \xrightarrow{\mathcal{T}} -\mathbf{L}.$$

С учетом естественного определения действия обращения времени на координаты

$$\mathbb{T} \mathbf{x} \mathbb{T}^{-1} = \mathbf{x}, \quad \mathbb{T} \nabla \mathbb{T}^{-1} = \nabla,$$

находим, что

$$\mathbb{T} \mathbf{L} \mathbb{T}^{-1} = -\mathbf{L},$$

если только

$$\mathbb{T} i \mathbb{T}^{-1} = -i,$$

а значит, оператор обращения времени антилинейный. К такому же выводу об антилинейности инверсии времени можно прийти, если рассмотреть преобразование энергии и импульса частицы, которая движется по траектории в обратную сторону, а именно,

$$p_0 \xrightarrow{\mathcal{T}} p_0, \quad \mathbf{p} \xrightarrow{\mathcal{T}} -\mathbf{p}.$$

Из антилинейности следует, например, что вектор, отвечающий генератору бустов для скалярных полей (спиновая матрица тождественно равна нулю)

$$\mathbf{K} = i \left(ct \nabla + \frac{\mathbf{x}}{c} \partial_t \right),$$

вопреки наивным ожиданиям, сохраняется:

$$\mathbb{T} \mathbf{K} \mathbb{T}^{-1} = \mathbf{K},$$

так как

$$\mathbb{T} t \mathbb{T}^{-1} = -t, \quad \mathbb{T} \partial_t \mathbb{T}^{-1} = -\partial_t.$$

Полное отражение пространства-времени строится как произведение $\mathbb{P} \cdot \mathbb{T}$. Произведение этой дискретной симметрии на элементы $SO_+^\uparrow(3, 1)$ дает элементы несобственных антиортохронных преобразований $SO_-^\downarrow(3, 1)$ с

$$\det \Lambda = -1, \quad \Lambda_0^0 \leq -1. \quad (3.41)$$

Под действием оператора \mathbb{PT} генераторы преобразований группы Лоренца меняют знак:

$$\mathbb{PT} \mathbf{L} (\mathbb{PT})^{-1} = -\mathbf{L}, \quad \mathbb{PT} \mathbf{K} (\mathbb{PT})^{-1} = -\mathbf{K}.$$

В результате действия операции полного отражения мы получаем движение в зеркальном мире с обращенной стрелой времени, т.е. обратно по времени.

Введем операцию комплексного сопряжения \mathbb{K} , которая, очевидно, не меняет координаты и метрику пространства Минковского, но также формально обращает знаки генераторов:

$$\mathbb{K} \mathbf{L} \mathbb{K}^{-1} = -\mathbf{L}, \quad \mathbb{K} \mathbf{K} \mathbb{K}^{-1} = -\mathbf{K}.$$

Поэтому, действие комбинированного оператора \mathbb{KPT} на генераторы преобразований группы Лоренца сводится к тождественному: отсюда следует, что величины, инвариантные относительно собственной ортохронной группы Лоренца, например, вещественное действие для скалярных полей, после преобразования операции \mathbb{KPT} остаются инвариантными относительно этой же группы. Это утверждение есть качественное указание на CPT-теорему в релятивистской квантовой механике, где оператору комплексного сопряжения соответствует оператор зарядового сопряжения \mathbb{C} , действующий на состояния частиц (в отличие от его представления в виде комплексного сопряжения, действующего на поля и генераторы группы Лоренца).

Полная группа вращений и бустов пространства Минковского включает в себя и дискретные симметрии, т.е. все компоненты: собственные и несобственные вращения, ортохронные и антиортохронные бусты.

3.5. Классификация состояний: представления

Действие преобразований группы Лоренца на классические поля классифицируется введением базисов собственных функций для генераторов группы. Для этого необходимо выделить допустимые совместно измеримые, т.е. взаимно коммутирующие, величины. Введем комбинации генераторов

$$\mathcal{J}^\pm = \frac{1}{2\hbar} (j \pm i\mathbf{K}). \quad (3.42)$$

Тогда коммутационные соотношения для этих величин получаются подстановкой известных коммутаторов для генераторов вращений и бустов [см. (3.29)], так что (здесь индексы в 3-мерном евклидовом пространстве расположены снизу для упрощения записи)

$$\begin{aligned} [\mathcal{J}_\alpha^+, \mathcal{J}_\beta^+] &= i\epsilon_{\alpha\beta\gamma} \mathcal{J}_\gamma^+, \\ [\mathcal{J}_\alpha^-, \mathcal{J}_\beta^-] &= i\epsilon_{\alpha\beta\gamma} \mathcal{J}_\gamma^-, \\ [\mathcal{J}_\alpha^+, \mathcal{J}_\beta^-] &= 0, \end{aligned} \quad (3.43)$$

а также

$$[(\mathcal{J}^+)^2, \mathcal{J}_\beta^+] = 0, \quad [(\mathcal{J}^-)^2, \mathcal{J}_\beta^-] = 0. \quad (3.44)$$

Эти соотношения показывают, что алгебра генераторов группы Лоренца $SO(3, 1)$ эквивалентна (изоморфна) паре алгебр группы вращений $SU(2) \otimes SU(2)$: $so(3, 1) \cong su(2) \oplus su(2)$. Поэтому поля можно разлагать по базису собственных значений операторов

$$\begin{aligned} (\mathcal{J}^+)^2 \bar{\chi}(x) &= \lambda_+(\lambda_+ + 1) \bar{\chi}(x), & \lambda_+ - \text{полуцелое}, \\ \mathcal{J}_3^+ \bar{\chi}(x) &= m_+ \bar{\chi}(x), & m_+ \in \{\lambda_+, \lambda_+ - 1, \dots, 1 - \lambda_+, -\lambda_+\}, \end{aligned} \quad (3.45)$$

и

$$\begin{aligned} (\mathcal{J}^-)^2 \theta(x) &= \lambda_-(\lambda_- + 1) \theta(x), & \lambda_- - \text{полуцелое}, \\ \mathcal{J}_3^- \theta(x) &= m_- \theta(x), & m_- \in \{\lambda_-, \lambda_- - 1, \dots, 1 - \lambda_-, -\lambda_-\}. \end{aligned} \quad (3.46)$$

Значит, базис полей можно характеризовать парой чисел (λ_+, λ_-) , имея ввиду возможность вырождения по проекциям m_\pm : поля $\bar{\chi}$ и θ могут иметь $2\lambda_+ + 1$ и $2\lambda_- + 1$ компонент, соответственно.

Обратные преобразования

$$\begin{aligned} \mathbf{j} &= \hbar\{\mathcal{J}^+ + \mathcal{J}^-\}, \\ \mathbf{K} &= -i\hbar\{\mathcal{J}^+ - \mathcal{J}^-\}, \end{aligned} \quad (3.47)$$

показывают, во-первых, что генератор вращений принимает вещественные значения, а генератор бустов — чисто мнимые: такие представления группы Лоренца называются неунитарными. Во-вторых, компонентные поля

$$\Psi(x) = \begin{pmatrix} \bar{\chi} \\ \theta \end{pmatrix}$$

допускают затем еще и разложение по базису с определенными значениями \mathbf{j} .

Спиноры: от $SO(3, 1)$ к $SL(2, \mathbb{C})$. Наличие полуцелых значений λ_\pm указывает на важнейший факт: подобно тому, как группа вращений 3-мерного евклидова пространства $SO(3)$ при введении спиноров обобщалась до группы вращений спиноров $SU(2)$, так и группа Лоренца пространства Минковского обобщается до группы преобразований релятивистских спиноров $SL(2, \mathbb{C})$. В самом деле, рассмотрим поля — релятивистские спиноры-столбцы, которые характеризуются парами (λ_+, λ_-)

$$\bar{\chi}^{\dot{\alpha}} \leftrightarrow \left(\frac{1}{2}, 0\right),$$

и

$$\theta_\alpha \leftrightarrow \left(0, \frac{1}{2}\right),$$

где индексы $\dot{\alpha}$, α принимают значения 1, 2. Для спинора $\bar{\chi}$

$$\mathcal{J}^+ = \frac{1}{2} \sigma, \quad \mathcal{J}^- = 0,$$

где σ — матрицы Паули, так что

$$\mathbf{j} = \frac{\hbar}{2} \sigma, \quad \mathbf{K} = -i \frac{\hbar}{2} \sigma.$$

Совершенно аналогично для спинора θ

$$\mathcal{J}^- = \frac{1}{2} \sigma, \quad \mathcal{J}^+ = 0,$$

и

$$\mathbf{j} = \frac{\hbar}{2} \sigma, \quad \mathbf{K} = i \frac{\hbar}{2} \sigma.$$

Матрица преобразований для θ записывается в стандартном виде

$$\Lambda_- = \exp \{ -i(\mathbf{j} \cdot \boldsymbol{\phi} + \mathbf{K} \cdot \boldsymbol{\vartheta})/\hbar \} = \exp \{ -\frac{i}{2} \sigma \cdot \boldsymbol{\phi} + \frac{1}{2} \sigma \cdot \boldsymbol{\vartheta} \}. \quad (3.48)$$

В силу тождества, которое легко доказать переходя к базису собственных значений матрицы A

$$\det e^A = e^{\text{tr} A},$$

где $\text{tr} A$ означает взятие следа матрицы A (сумма собственных значений), матрицы 2×2 самого общего вида $M_\alpha^\beta = (\Lambda_-)_\alpha^\beta$ имеют единичный детерминант: специальные матрицы (символ S);

$$\det M = 1,$$

так как матрицы Паули образуют базис для комплекснозначных матриц (символ \mathbb{C}) со следом, равным нулю. Поскольку матрицы задают линейные преобразования спиноров (символ L), группа преобразований спиноров носит название $SL(2, \mathbb{C})$.

Матрица преобразований для спиноров $\bar{\chi}$

$$\Lambda_+ = \exp \{ -i(\mathbf{j} \cdot \boldsymbol{\phi} + \mathbf{K} \cdot \boldsymbol{\vartheta})/\hbar \} = \exp \{ -\frac{i}{2} \sigma \cdot \boldsymbol{\phi} - \frac{1}{2} \sigma \cdot \boldsymbol{\vartheta} \} \quad (3.49)$$

может быть получена, как и в случае нерелятивистских спиноров, с помощью сопряжения

$$\Lambda_+ = \sigma_2 \cdot \Lambda_-^* \cdot \sigma_2. \quad (3.50)$$

Поэтому спиноры²

$$\bar{\theta}^{\dot{\alpha}} = \{ (i\sigma_2 \theta)_\alpha \}^* = \mathbb{K} (i\sigma_2 \theta)_\alpha \equiv \theta_{cp}$$

преобразуются как спиноры $(\frac{1}{2}, 0)$, а спиноры

$$\chi_\alpha = \{ (-i\sigma_2 \bar{\chi})^{\dot{\alpha}} \}^* = \mathbb{K} (-i\sigma_2 \bar{\chi})^{\dot{\alpha}} \equiv (\bar{\chi})_{cp}$$

преобразуются как спиноры $(0, \frac{1}{2})$.

Кроме того, из явного вида матриц следует, что

$$\Lambda_-^\dagger = \Lambda_+^{-1}. \quad (3.51)$$

²Мы ввели здесь индекс cp , смысл которого будет выяснен и обоснован ниже.

Определим матрицы

$$\begin{aligned}(\sigma^m)_{\alpha\dot{\alpha}} &= (1, +\sigma), \\ (\bar{\sigma}^m)^{\dot{\alpha}\alpha} &= (1, -\sigma).\end{aligned}\tag{3.52}$$

Тогда

$$(\sigma^m \bar{\sigma}^n + \sigma^n \bar{\sigma}^m)_{\beta}^{\alpha} = 2 g^{mn} \delta_{\beta}^{\alpha},\tag{3.53}$$

$$(\bar{\sigma}^m \sigma^n + \bar{\sigma}^n \sigma^m)^{\dot{\alpha}}_{\dot{\beta}} = 2 g^{mn} \delta_{\dot{\beta}}^{\dot{\alpha}},\tag{3.54}$$

а также введем антисимметричные символы

$$\frac{i}{4}(\sigma^m \bar{\sigma}^n - \sigma^n \bar{\sigma}^m)_{\beta}^{\alpha} = (\sigma^{mn})_{\beta}^{\alpha},\tag{3.55}$$

$$\frac{i}{4}(\bar{\sigma}^m \sigma^n - \bar{\sigma}^n \sigma^m)^{\dot{\alpha}}_{\dot{\beta}} = (\bar{\sigma}^{mn})^{\dot{\alpha}}_{\dot{\beta}}.\tag{3.56}$$

Отсюда легко заметить, что для пространственных компонент

$$\sigma^{\mu\nu} = \bar{\sigma}^{\mu\nu} = \frac{1}{2} \epsilon_{\mu\nu\rho} \sigma^{\rho},$$

а для временных

$$\bar{\sigma}^{0\mu} = -\sigma^{0\mu} = \frac{i}{2} \sigma^{\mu}.$$

Поэтому матрицы преобразований представимы в виде

$$\Lambda_- = \exp \left\{ -\frac{i}{2} \sigma^{mn} \omega_{mn} \right\}, \quad \Lambda_+ = \exp \left\{ -\frac{i}{2} \bar{\sigma}^{mn} \omega_{mn} \right\}.$$

Спинорная метрика

$$\epsilon^{\alpha\beta} = i\sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$$

поднимает индекс спинора θ_{β} и переводит его в спинор-строку:

$$\theta^{\alpha} = \epsilon^{\alpha\beta} \theta_{\beta} = (i\sigma_2 \theta)^T = \theta_{cp}^{\dagger} = -\theta^T i\sigma_2 = -\theta_{\beta} \epsilon^{\beta\alpha}.$$

Поэтому преобразование по верхним индексам без точки производится матрицей

$$-i\sigma_2 \Lambda_-^T i\sigma_2 = \Lambda_-^{-1}, \quad \Leftrightarrow \quad \hat{\epsilon} \Lambda_-^T \hat{\epsilon} = \Lambda_-^{-1}$$

откуда следует, что, во-первых,

$$\theta^{\alpha} \psi_{\alpha} = \theta_{cp}^{\dagger} \psi = \text{inv.}$$

является инвариантом относительно группы $SL(2, \mathbb{C})$ и, следовательно, группы Лоренца, а во-вторых, спинорная метрика также сохраняется при действии группы релятивистских преобразований спиноров:

$$\epsilon'^{\alpha\beta} = \epsilon^{\mu\nu} (\Lambda_-^{-1})_{\mu}^{\alpha} (\Lambda_-^{-1})_{\nu}^{\beta} = \left\{ (\Lambda_-^{-1})^T \hat{\epsilon} \Lambda_-^{-1} \right\}^{\alpha\beta} = \epsilon^{\alpha\beta}.$$

Аналогичные конструкции метрики и инвариантной свертки имеют место и для спиноров с точечными индексами: инвариантная спинорная метрика $\epsilon^{\dot{\alpha}\dot{\beta}}$ с нормировкой $\epsilon^{12} = 1$,

спиноры-строки $\bar{\chi}_{\dot{\alpha}} = \epsilon_{\dot{\alpha}\dot{\beta}} \bar{\chi}^{\dot{\beta}} = \{(-i\sigma_2)\bar{\chi}\}^T = \{(\bar{\chi})_{cp}\}^\dagger$ преобразуются матрицей $\Lambda_+^{-1} = \Lambda_-^\dagger$, и $\bar{\chi}_{\dot{\alpha}} \bar{\phi}^{\dot{\alpha}} = \bar{\chi}_{cp}^\dagger \bar{\phi} = \text{inv.}$

4-вектор. Произвольная эрмитово самосопряженная величина \hat{V} в представлении $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2})$, т.е. несущая пару индексов $\{\alpha\dot{\alpha}\}$, может быть разложена по базису матриц σ^n :

$$(\hat{V})_{\alpha\dot{\alpha}} = \sigma_{\alpha\dot{\alpha}}^n V_n, \quad (3.57)$$

причем

$$V^m = \frac{1}{2} \text{tr}\{\bar{\sigma}^m \hat{V}\}, \quad (3.58)$$

так как, очевидно,

$$\text{tr}\{\bar{\sigma}^m \sigma^n\} = 2g^{mn}. \quad (3.59)$$

Согласно установленным нами законами преобразования верхних и нижних спинорных индексов, преобразования группы $SL(2, \mathbb{C})$ переводят \hat{V} в эрмитову величину

$$\hat{V}' = \Lambda_- \hat{V} \Lambda_-^\dagger, \quad (3.60)$$

которая опять может быть разложена по исходному базису:

$$V'^m = \frac{1}{2} \text{tr}\{\bar{\sigma}^m \hat{V}'\}.$$

Заметим, что

$$\det \hat{V}' = \det\{\Lambda_- \hat{V} \Lambda_-^\dagger\} = |\det \Lambda_-|^2 \det \hat{V} = \det \hat{V}. \quad (3.61)$$

При этом

$$\hat{V} = \begin{pmatrix} V_0 + V_3 & V_1 - iV_2 \\ V_1 + iV_2 & V_0 - V_3 \end{pmatrix},$$

так что

$$\det \hat{V} = V_0^2 - \mathbf{V}^2,$$

а равенство детерминантов (3.61) означает, что преобразование сохраняет лоренц-инвариантную длину 4-вектора, т.е. представляет собой элемент группы Лоренца на 4-векторах. Это представление является двузначным, так как матрицы Λ_- и $-\Lambda_-$ приводят к идентичным преобразованиям 4-вектора.

В случае инфинитезимальных преобразований $\omega^{kl} \rightarrow 0$

$$\Lambda_- = \mathbb{1} - \frac{i}{2} \sigma_{kl} \omega^{kl}, \quad \Lambda_-^\dagger = \mathbb{1} + \frac{i}{2} \bar{\sigma}_{kl} \omega^{kl},$$

находим, что

$$V'^m = V^m + \frac{i}{4} \text{tr}\{\bar{\sigma}_{kl} \bar{\sigma}^m \sigma^n - \sigma_{kl} \sigma^n \sigma^m\} \omega^{kl} V_n,$$

где, например, разложение на симметричную и антисимметричную по перестановке индексов части

$$\bar{\sigma}^m \sigma^n = g^{mn} - 2i \bar{\sigma}^{mn}$$

приводит к

$$\text{tr}\{\bar{\sigma}_{kl} \bar{\sigma}^m \sigma^n\} = -2i \text{tr}\{\bar{\sigma}_{kl} \bar{\sigma}^{mn}\},$$

и затем, как легко заметить, используя явный вид генераторов,

$$\text{tr}\{\bar{\sigma}_{kl}\bar{\sigma}^{mn}\} = \frac{1}{2}\{\delta_k^m\delta_l^n - \delta_k^n\delta_l^m\} - \frac{i}{2}\hat{\epsilon}_{kl}^{mn}.$$

Совершенно аналогично

$$\text{tr}\{\sigma_{kl}\sigma^{mn}\} = \frac{1}{2}\{\delta_k^m\delta_l^n - \delta_k^n\delta_l^m\} + \frac{i}{2}\hat{\epsilon}_{kl}^{mn}.$$

В итоге, приведение подобных членов дает

$$V'^m = V^m + \omega^{mn} V_n,$$

т.е. инфинитезимальное преобразование 4-вектора. Отсюда, в частности, следует, что величины

$$\theta\sigma^m\bar{\chi} = \theta^\alpha\sigma_{\alpha\dot{\alpha}}^m\bar{\chi}^{\dot{\alpha}} \quad \text{и} \quad \bar{\theta}\bar{\sigma}^m\chi = \bar{\theta}_{\dot{\alpha}}(\bar{\sigma}^m)^{\dot{\alpha}\alpha}\chi_\alpha$$

ведут себя как 4-векторы.

Таким образом, мы построили схему представления полей в базисе, характеризуемом парой $\{\lambda_+, \lambda_-\}$ в группе $SL(2, \mathbb{C})$, и продемонстрировали процедуру применения этой схемы на примере полей спиноров и 4-векторов. Подчеркнем, что действие группы на релятивистских полях не сводится, вообще говоря, к унитарным преобразованиям, как это имело место, например, в нерелятивистской квантовой механике с трансляциями и вращениями. Поэтому сами эти поля, скорее всего, не могут рассматриваться в качестве волновых функций или векторов состояний релятивистских частиц в гильбертовом пространстве. Например, в случае спиноров, поскольку $(\theta_\alpha)^\dagger = \bar{\theta}_{\dot{\alpha}}$ и $(\bar{\chi}^{\dot{\alpha}})^\dagger = \chi^\alpha$, величины

$$\theta^\dagger\theta = \delta^{\dot{\alpha}\alpha}\bar{\theta}_{\dot{\alpha}}\theta^\alpha = \bar{\theta}\bar{\sigma}^0\theta,$$

и

$$\bar{\chi}^\dagger\bar{\chi} = \delta_{\dot{\alpha}\alpha}\chi^\alpha\bar{\chi}^{\dot{\alpha}} = \chi\sigma^0\bar{\chi},$$

преобразуются как нулевые компоненты 4-векторов и не являются скалярами. Впрочем, их можно рассматривать как пространственные плотности, так как интегралы

$$\int d^3\mathbf{x}\bar{\theta}\bar{\sigma}^0\theta \quad \text{и} \quad \int d^3\mathbf{x}\chi\sigma^0\bar{\chi}$$

являются релятивистскими инвариантами. Поэтому для окончательного решения вопроса о возможности считать эти инварианты вероятностями необходимо построить уравнения движения для полей, исходя из вариационного принципа, с каноническим определением положительно определенного гамильтониана и рассмотреть его совместимость с положительной определенностью вероятностей.

Лекция № 4

Трансляции и неоднородная группа Лоренца, коммутаторы генераторов, вектор Паули–Любанского, классификация Вигнера для массивных и безмассовых полей, спиральность, киральные поля, действие дискретных преобразований на генераторы, СРТ-теорема, свободные классические вещественное и комплексное скалярные поля, положительно- и отрицательно-частотные решения, совокупность осцилляторов, динамические переменные поля и их квантование, операторы рождения и уничтожения скалярных частиц, их зависимость от времени и координаты, классическое поле как среднее значение оператора поля по когерентным состояниям, вторичное квантование и пространство Фока, оператор заряда, античастицы, зарядовое сопряжение и инверсии пространства и времени в фоковском пространстве и их действие на квантованное скалярное поле.

4.1. Группа Пуанкаре

Трансляции декартовых координат пространства Минковского

$$x'^k = x^k + a^k = \exp\{\partial_n a^n\} x^k = \exp\left\{-\frac{i}{\hbar} p_n a^n\right\} x^k \quad (4.1)$$

где генератор сдвигов — оператор 4-импульса:

$$p_n = i\hbar \partial_n,$$

не преобразует тензорные индексы полей, так что, например, для векторного поля

$$A'_k(x') = A_k(x).$$

С учетом

$$A'_k(x') = A'_k(x + a) = \exp\left\{-\frac{i}{\hbar} p_n a^n\right\} A'_k(x),$$

находим

$$A'_k(x) = \exp\left\{\frac{i}{\hbar} p_n a^n\right\} A_k(x). \quad (4.2)$$

Полная группы Пуанкаре есть объединение группы трансляций и группы Лоренца. В таком случае говорят также о неоднородной (Inhomogeneous) группе Лоренца: $ISO(3, 1)$.

Для того чтобы определить допустимый базис разложения полей, теперь необходимо установить и коммутационные соотношения для генераторов трансляций и генераторов группы Лоренца. Поскольку генераторы трансляций — линейные дифференциальные операторы, они, естественно, коммутируют между собой, а также со спинными генераторами, которые представляют собой числовые матрицы:

$$[p_k, p_n] = 0, \quad [p_k, S_{mn}] = 0. \quad (4.3)$$

Остальные коммутаторы легко найти, используя их явный вид, так что

$$\begin{aligned} [j^\alpha, p^\beta] &= i \epsilon_{\alpha\beta\gamma} p^\gamma, & [j^\alpha, p_0] &= 0, \\ [K^\alpha, p^\beta] &= i \delta^{\alpha\beta} p_0, & [K^\alpha, p_0] &= i p^\alpha. \end{aligned} \quad (4.4)$$

Значит, 4-вектор импульса преобразуется при вращениях и бустах, как это и должно быть, причем

$$[j^\alpha, p^2] = [K^\alpha, p^2] = 0, \quad (4.5)$$

т.е. сохраняется релятивистский инвариант.

Другой инвариант был введен Паули и Любанским. Псевдовектор Паули–Любанского определяется как

$$W^m = -\frac{1}{2} \epsilon^{mnkl} p_n S_{kl}, \quad (4.6)$$

причем

$$p \cdot W = 0.$$

Тогда его квадрат коммутирует со всеми генераторами:

$$[j^\alpha, W^2] = [K^\alpha, W^2] = [p_k, W^2] = 0, \quad (4.7)$$

компоненты этого псевдовектора естественным образом преобразуются при действии группы Лоренца.

Теория группы Пуанкаре в квантовой механике была построена Вигнером. Согласно Вигнеру физическим состояниям релятивистской частицы отвечают положительные значения энергии или нулевая энергия для вакуума:

$$p_0 \geq 0,$$

а также 4-импульсы с неотрицательной инвариантной массой,

$$p^2 \geq 0,$$

(гипотетические частицы с $p^2 < 0$ называют тахионами). Тогда значение W^2 задается детерминантом

$$W^2 = -\frac{1}{4} \begin{vmatrix} \delta_{n'}^n & \delta_{k'}^n & \delta_{l'}^n \\ \delta_{n'}^k & \delta_{k'}^k & \delta_{l'}^k \\ \delta_{n'}^l & \delta_{k'}^l & \delta_{l'}^l \end{vmatrix} p_n p^{n'} S_{kl} S^{k'l'},$$

что можно представить в виде

$$-\frac{1}{4} \{p_n p^n S_{kl} S^{kl} + p_n p^l S_{kl} S^{nk} + p_n p^k S_{kl} S^{ln} - p_n p^l S_{kl} S^{kn} - p_n p^k S_{kl} S^{ml} - p_n p^n S_{kl} S^{lk}\},$$

и после использования антисимметрии тензора спина

$$W^2 = -\frac{1}{2} \{p^2 S^2 - 2 p_n p^k S_{kl} S^{nl}\}.$$

Затем рассматривают случаи массивных и безмассовых частиц.

4.1.1. Массивные частицы

При $p^2 = m^2 > 0$ квадрат 4-вектора W^2 , т.е. релятивистский инвариант, удобно вычислить в системе покоя частицы. Тогда $p = (m, \mathbf{0})$, и

$$W^2 = -\frac{1}{2} m^2 \{S_{kl} S^{kl} - 2S_{0\alpha} S^{0\alpha}\} = -\frac{1}{2} m^2 S_{\alpha\beta} S^{\alpha\beta} = -m^2 \hbar^2 s^2 = -m^2 \hbar^2 s(s+1).$$

Значит, при заданной массе собственное значение W^2 задается квадратом спина, и состояние свободной массивной частицы можно характеризовать полным набором наблюдаемых — масса, импульс, спин и его проекция на произвольную ось: $\{m, \mathbf{p}, s, s_z\}$, — все эти наблюдаемые коммутируют между собой.

4.1.2. Безмассовые частицы

При $p^2 = 0$

$$\begin{aligned} W^2 &= p_n p^k S_{kl} S^{nl} = p_n p^k S_{k0} S^{n0} + p_n p^k S_{k\alpha} S^{n\alpha} \\ &= -p^\alpha p^\beta S_{0\alpha} S^{0\beta} + p_0^2 S^{0\alpha} S_{0\alpha} - p^\gamma p^\beta S^{\gamma\alpha} S_{\beta\alpha} + p_0 p^\beta (S_{\beta\alpha} S^{0\alpha} - S_{0\alpha} S^{\beta\alpha}) \\ &= \hbar^2 \left\{ (\mathbf{p} \cdot \mathbf{K})^2 - p_0^2 \mathbf{K}^2 - (\mathbf{p} \times \mathbf{s})^2 + p_0 \mathbf{p} \cdot \{(\mathbf{s} \times \mathbf{K}) - (\mathbf{K} \times \mathbf{s})\} \right\}. \end{aligned}$$

Раскрывая квадрат векторного произведения, находим

$$\frac{1}{\hbar^2} W^2 = -p_0^2 (s^2 + \mathbf{K}^2) + (\mathbf{p} \cdot \mathbf{s})^2 + (\mathbf{p} \cdot \mathbf{K})^2 + p_0 \mathbf{p} \cdot \{(\mathbf{s} \times \mathbf{K}) - (\mathbf{K} \times \mathbf{s})\}.$$

Выражая генераторы спина и бустов через эрмитовы векторы \mathcal{J}^+ и \mathcal{J}^- , получаем

$$W^2 = -4p_0^2 \hbar^2 \left\{ \mathcal{J}^+ \cdot \mathcal{J}^- - \frac{1}{p_0^2} (\mathbf{p} \cdot \mathcal{J}^+) (\mathbf{p} \cdot \mathcal{J}^-) - \frac{i}{p_0} \mathbf{p} \cdot (\mathcal{J}^+ \times \mathcal{J}^-) \right\}.$$

Выберем ось проектирования спина вдоль пространственной компоненты импульса: $\mathbf{p} = (0, 0, p_0)$, откуда $\mathbf{p} \cdot \mathcal{J} = p_0 \mathcal{J}_3$, тогда

$$W^2 = -4p_0^2 \hbar^2 \{ \mathcal{J}_1^+ \mathcal{J}_1^- + \mathcal{J}_2^+ \mathcal{J}_2^- - i(\mathcal{J}_1^+ \mathcal{J}_2^- - \mathcal{J}_2^+ \mathcal{J}_1^-) \}$$

или

$$W^2 = -4p_0^2 \hbar^2 \{ \mathcal{J}_1^+ + i\mathcal{J}_2^+ \} \{ \mathcal{J}_1^- - i\mathcal{J}_2^- \} = -4p_0^2 \hbar^2 \mathcal{J}_+^+ \mathcal{J}_+^-.$$

В искомом базисе поля удовлетворяют уравнению на собственные значения оператора W^2 . Но у повышающего оператора в группе $SU(2)$ существуют только два собственных вектора: во-первых, это вакуум с нулевым моментом

$$\mathcal{J}^\pm |0\rangle = 0, \quad (4.8)$$

а во-вторых, это старший вектор с нулевым собственным значением

$$\mathcal{J}_+^+ |\lambda_+, \lambda_+\rangle = 0. \quad (4.9)$$

Точно также для понижающего оператора есть два собственных вектора: вакуум (4.8) и младший вектор с нулевым собственным значением

$$\mathcal{J}_-^- |\lambda_-, -\lambda_-\rangle = 0. \quad (4.10)$$

При этом, конечно, на этих полях (т.е. при действии операторов на поля) проекция спина на ось импульса или, как говорят, спиральность имеет значения

$$\frac{\mathbf{p} \cdot \mathcal{J}^\pm}{p_0} = \mathcal{J}_3^\pm = \pm \lambda_\pm.$$

Причем на физических полях $W^2 = 0$.

Таким образом, среди безмассовых полей со спином базис составляют так называемые киральные поля полуцелого спина и поляризованные поля целого спина:

правые поля с положительной киральностью и спиральностью $\mathfrak{s} = \lambda_+$,

$$\mathcal{J}^- \equiv 0 \quad \Rightarrow \quad \mathcal{K} = -i\mathbf{s}, \quad \mathcal{J}^+ = \mathbf{s}, \quad (4.11)$$

левые поля с отрицательной киральностью и спиральностью $\mathfrak{s} = -\lambda_-$,

$$\mathcal{J}^+ \equiv 0 \quad \Rightarrow \quad \mathcal{K} = i\mathbf{s}, \quad \mathcal{J}^- = \mathbf{s}, \quad (4.12)$$

а также их *произведения и вакуум*.

Рассмотрим компоненты псевдовектора Паули–Любанского для киральных и поляризованных полей. С учетом

$$S_{\beta\gamma} = \hbar \epsilon_{\beta\gamma\rho} \mathbf{s}^\rho$$

нулевая компонента

$$W_0 = -\frac{1}{2} \hat{\epsilon}^{0\alpha\beta\gamma} p_\alpha S_{\beta\gamma} = \hbar \mathbf{p} \cdot \mathbf{s} = \pm p_0 \hbar \lambda_\pm.$$

При вычислении пространственной компоненты необходимо использовать то, что

$$\frac{1}{\hbar} S_{0\gamma} = \mathcal{K}^\gamma = \mp i \mathbf{s}^\gamma,$$

откуда

$$W^\alpha = -\frac{1}{2} \hat{\epsilon}^{\alpha 0\beta\gamma} p_0 S_{\beta\gamma} - \frac{1}{2} 2 \hat{\epsilon}^{\alpha\beta 0\gamma} p_\beta S_{0\gamma} = \hbar \{p_0 \mathbf{s}^\alpha \mp i (\mathbf{p} \times \mathbf{s})^\alpha\}.$$

Поэтому при $\mathbf{p} \uparrow\uparrow z$

$$\begin{aligned} \frac{1}{\hbar} W^{(3)} &= p_0 \mathcal{J}_3^\pm = \pm \lambda_\pm p_0, \\ \frac{1}{\hbar} W^{(2)} &= p_0 \mathcal{J}_2^\pm \mp i p_0 \mathcal{J}_1^\pm = \pm i p_0 \mathcal{J}_\pm^\pm = 0, \\ \frac{1}{\hbar} W^{(1)} &= p_0 \mathcal{J}_1^\pm \pm i p_0 \mathcal{J}_2^\pm = p_0 \mathcal{J}_\pm^\pm = 0, \end{aligned}$$

где равенства понимаются в слабом смысле, т.е. они имеют место при действии операторов на поля. Эти результаты представимы в простой ковариантной форме в виде пропорциональности 4-векторов

$$\frac{1}{\hbar} W^k = \mathfrak{s} p^k, \quad \mathfrak{s} = \pm \lambda_\pm. \quad (4.13)$$

Это согласуется с установленными нами условиями для ненулевых 4-векторов:

$$p^2 = 0, \quad W^2 = 0, \quad p \cdot W = 0,$$

откуда следует их пропорциональность (4.13).

4.2. Ковариантный вид коммутаторов и дискретные симметрии

Собирая приведенные выше покомпонентные коммутационные соотношения для генераторов группы Пуанкаре, выпишем в целях полноты изложения эти коммутаторы в ковариантном виде

$$[J_{mn}, J_{kl}] = -i\hbar \{g_{mk}J_{nl} - g_{ml}J_{nk} + g_{nl}J_{mk} - g_{nk}J_{ml}\}, \quad (4.14)$$

что можно также установить непосредственно, используя явный вид генераторов L_{mn} . Аналогично,

$$[J_{mn}, p_k] = -i\hbar \{g_{mk}p_n - g_{nk}p_m\}. \quad (4.15)$$

Относительно зеркальных инверсий пространства операторы спина и момента являются тензорами

$$\mathbb{P} J_{mn} \mathbb{P}^{-1} = \mathcal{P}_m^k \mathcal{P}_n^l J_{kl}, \quad (4.16)$$

где \mathcal{P} — симметричная диагональная матрица преобразований координат при инверсии. Напомним, что оператор спина $\mathbf{s}^\gamma = \frac{1}{2}\epsilon^{\alpha\beta\gamma}S_{\alpha\beta}$ — псевдовектор. Импульс является вектором:

$$\mathbb{P} p_m \mathbb{P}^{-1} = \mathcal{P}_m^k p_k, \quad (4.17)$$

и соответственно, вектор Паули–Любанского — псевдовектор:

$$\mathbb{P} W_m \mathbb{P}^{-1} = -\mathcal{P}_m^k W_k. \quad (4.18)$$

Из последних двух уравнений (4.18) и (4.17) заключаем, что *спиральность безмассовой частицы меняет знак при пространственных инверсиях*:

$$\mathbf{s} \xrightarrow{\mathbb{P}} -\mathbf{s}.$$

Аналогично, для действия оператора обращения стрелы времени с учетом его антилинейности находим, что импульс является вектором с отрицательной T -четностью

$$\mathbb{T} p_m \mathbb{T}^{-1} = -\mathcal{T}_m^k p_k, \quad (4.19)$$

а генераторы 4-вращений — тензором 2-го ранга с отрицательной T -четностью

$$\mathbb{T} J_{mn} \mathbb{T}^{-1} = -\mathcal{T}_m^k \mathcal{T}_n^l J_{kl}, \quad (4.20)$$

где \mathcal{T} — соответствующая матрица преобразований декартовых координат пространства Минковского. Вектор Паули–Любанского также имеет отрицательную T -четность:

$$\mathbb{T} W_m \mathbb{T}^{-1} = -\mathcal{T}_m^k W_k. \quad (4.21)$$

Поэтому *спиральность безмассовых частиц сохраняется при обращении стрелы времени*:

$$\mathbf{s} \xrightarrow{\mathbb{T}} \mathbf{s}.$$

С учетом матричного произведения

$$\mathcal{P}_m^k \mathcal{T}_l^k = -\delta_m^l,$$

действие антиунитарного преобразования полной инверсии пространства Минковского \mathbb{PT} дает

$$\mathbb{PT} p^n (\mathbb{PT})^{-1} = p^n, \quad \mathbb{PT} J_{mn} (\mathbb{PT})^{-1} = -J_{mn}, \quad \mathbb{PT} W^n (\mathbb{PT})^{-1} = -W^n, \quad (4.22)$$

и обращение спиральности

$$\mathfrak{s} \xrightarrow{\mathbb{PT}} -\mathfrak{s}.$$

Действие для полей строится как функционал, зависящий от *самых полей и генераторов группы Пуанкаре* в соответствующих представлениях так, чтобы оно было инвариантно относительно преобразований собственной ортохронной группы Лоренца и пространственно-временных трансляций, т.е. так, чтобы действие было **скаляром**. Это, в частности, означает, что спинорные поля (фермионы) входят в виде би-линейных комбинаций, ковариантным образом преобразующихся при действии собственной ортохронной подгруппы Пуанкаре. Второе важнейшее свойство — действие является **вещественным** скаляром. Наконец, в третьих, *действие зависит от зарядов* частиц $g = Ye$, которые являются лоренцевыми скалярами, но при этом, значение безразмерных зарядовых констант Y может зависеть от поляризации поля³. Поэтому после полного пространственно-временного отражения мы приходим к действию

$$S[\Psi(x), p^n, J_{mn}, W^n, Y, e] \xrightarrow{\mathbb{PT}} S_{\mathbb{PT}} = S[\Psi_{\mathbb{PT}}(-x), p_n, -J_{mn}, -W^n, Y_{\mathbb{PT}}, e],$$

а условие его вещественности

$$S^* = S, \quad S \xleftrightarrow{\mathbb{K}} S,$$

с учетом действия комплексного сопряжения на генераторы

$$\mathbb{K} p^n \mathbb{K}^{-1} = -p^n, \quad \mathbb{K} J_{mn} \mathbb{K}^{-1} = -J_{mn}, \quad \mathbb{K} W^n \mathbb{K}^{-1} = W^n,$$

означает, что

$$S[\Psi(x), p^n, J_{mn}, W^n] \xrightarrow{\mathbb{PT}} S[\Psi_{\mathbb{PT}}^*(-x), -p_n, J_{mn}, -W^n].$$

Воспользуемся тем, что действие является функционалом, так что замена переменных с единичным якобианом

$$x^k \rightarrow -x^k$$

оставляет инвариантным и само действие и лагранжиан и согласно этой подстановке дает

$$p^n \rightarrow -p^n, \quad J_{mn} \rightarrow J_{mn}, \quad W^n \rightarrow -W^n,$$

так что

$$S[\Psi(x), p^n, J_{mn}, W^n] \xrightarrow{\mathbb{PT}} S[\Psi_{\mathbb{PT}}^*(x), p_n, J_{mn}, W^n].$$

Но комплексное сопряжение меняет знак комплексной фазы поля, а значит, и знак заряда, если понимать его как параметр некоторого калибровочного преобразования. В самом деле, при комплексном сопряжении калибровочное преобразование трансформируется согласно

$$\Psi_u(x) = e^{-iu \frac{g}{c\hbar}} \Psi(x) \mapsto \Psi_u^*(x) = e^{iu \frac{g}{c\hbar}} \Psi^*(x),$$

³Например, левые и правые киральные поля могут обладать разными зарядами, как это имеет место в Стандартной модели электрослабого взаимодействия, где в слабых взаимодействиях с передачей заряда (заряженные токи, как при бета-распаде нейтрона) участвуют лишь левые спиноры, в то время как заряд правых спиноров принят равным нулю.

так что соответствующий ток меняет знак

$$\frac{1}{c} j^n[\Psi_u(x)] = \frac{\delta S[\Psi_u(x)]}{\delta \partial_n \Psi_u(x)} \frac{\partial \Psi_u}{\partial u} \mapsto \frac{1}{c} j^n_{\mathbb{K}}[\Psi_u^*(x)] = \frac{\delta S[\Psi_u^*(x)]}{\delta \partial_n \Psi_u^*(x)} \frac{\partial \Psi_u^*}{\partial u} = -\frac{1}{c} j^n[\Psi_u^*(x)].$$

Поэтому говорят, что действие, полученное операцией полного пространственно-временного отражения \mathbb{PT} описывает зарядово сопряженные поля, для которых мы имеем те же значения генераторов группы Пуанкаре. Следовательно, движение в зеркальном мире с обратной стрелой времени описывает движение античастиц — частиц противоположного знака заряда. В итоге, комбинация комплексного сопряжения с полной инверсией пространства-времени после описанной замены координат дает для вещественного действия

$$S[\Psi(x), p^n, J_{mn}, W^n, Y, e] \xrightarrow{\mathbb{PT}} S[\Psi_{\mathbb{PT}}^*(x), p_n, J_{mn}, W^n, Y_{\mathbb{PT}}, -e].$$

Как мы увидим ниже, возможно введение независимой линейной операции, действующей на поля так, что сохраняются значения генераторов

$$\mathbb{C} p^n \mathbb{C}^{-1} = p^n, \quad \mathbb{C} J_{mn} \mathbb{C}^{-1} = J_{mn}, \quad \mathbb{C} W^n \mathbb{C}^{-1} = W^n, \quad (4.23)$$

и спиральности на преобразованных полях

$$\mathfrak{s} \xrightarrow{\mathbb{C}} \mathfrak{s},$$

но меняющей знаки зарядов

$$e \xrightarrow{\mathbb{C}} -e,$$

и восстанавливающей безразмерные зарядовые константы

$$Y_{\mathbb{CPT}} = Y.$$

Поэтому для действия получим

$$S[\Psi(x), p^n, J_{mn}, W^n, Y, e] \xrightarrow{\mathbb{CPT}} S_{\mathbb{CPT}} = S[\Psi_{\mathbb{CPT}}^*(x), p_n, J_{mn}, W^n, Y, e]. \quad (4.24)$$

Значит, операция \mathbb{CPT} приводит к действию на полях $\Psi_{\mathbb{CPT}}$, которые удовлетворяют тем же уравнениям движения, что и исходные поля Ψ , поскольку действие является \mathbb{CPT} -инвариантным, так как все генераторы преобразований и заряды остаются равными исходным значениям, что составляет содержание \mathbb{CPT} -теоремы Паули–Людерса–Вигнера.

4.3. Скалярное поле

У скалярного поля $\phi(x)$, которое реализует базис для полей $(0, 0)$ в представлении группы $SO(3, 1)$, спинные генераторы тождественно равны нулю, так что тождественно равен нулю и 4-вектор Паули–Любанского. Поэтому единственное уравнение для такого поля — уравнение на собственное значения квадрата 4-импульса:

$$(p^2 - m^2 c^2) \phi(x) = 0, \quad (4.25)$$

где, как обычно, $x = (ct, \mathbf{x})$, а генераторы трансляций задают 4-вектор

$$p_n = i\hbar \frac{\partial}{\partial x^n} \equiv i\hbar \partial_n.$$

Уравнение для скалярного поля, которое носит имя Кляйна–Гордона–Фока, может быть получено вариацией по полю $\phi(x)$ действия, инвариантного относительно преобразований группы трансляций и собственной ортохронной группы Лоренца,

$$S = \frac{1}{2c\hbar^2} \int d^4x \phi(x)(p^2 - m^2c^2)\phi(x). \quad (4.26)$$

Решение волнового уравнения для свободного вещественного скалярного поля можно представить в виде разложения по плоским волнам с положительными и отрицательными частотами и волновым вектором $\mathbf{k} = \mathbf{p}/\hbar$,

$$\phi(t, \mathbf{x}) = \int \frac{c d^3\mathbf{k}}{2\omega(2\pi)^3} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \{ \alpha(\omega, \mathbf{k}) e^{-i\omega t} + \beta(\omega, \mathbf{k}) e^{i\omega t} \}, \quad (4.27)$$

где

$$\omega = \frac{1}{\hbar} \sqrt{(mc^2)^2 + \hbar^2 \mathbf{k}^2}.$$

Комплексное сопряжение дает

$$\phi^*(t, \mathbf{x}) = \int \frac{c d^3\mathbf{k}}{2\omega(2\pi)^3} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \{ \alpha^*(\omega, \mathbf{k}) e^{i\omega t} + \beta^*(\omega, \mathbf{k}) e^{-i\omega t} \},$$

и условие вещественности поля

$$\phi^*(t, \mathbf{x}) = \phi(t, \mathbf{x})$$

означает, что

$$\beta(\omega, \mathbf{k}) = \alpha^*(\omega, -\mathbf{k}), \quad (4.28)$$

и в результате

$$\phi(t, \mathbf{x}) = \int \frac{c d^3\mathbf{k}}{2\omega(2\pi)^3} \{ \alpha(\omega, \mathbf{k}) e^{-i(\omega t - \mathbf{k}\cdot\mathbf{x})} + \alpha^*(\omega, \mathbf{k}) e^{i(\omega t - \mathbf{k}\cdot\mathbf{x})} \}. \quad (4.29)$$

Обычно определяют положительно и отрицательно частотные поля

$$\phi^{(\pm)}(t, \mathbf{x}) = \int \frac{c d^3\mathbf{k}}{2\omega(2\pi)^3} \alpha(\pm\omega, \pm\mathbf{k}) e^{\mp i(\omega t - \mathbf{k}\cdot\mathbf{x})}, \quad (4.30)$$

где

$$\alpha(-\omega, -\mathbf{k}) = \alpha^*(\omega, \mathbf{k}).$$

При этом «плюс»- и «минус»-поля переходят друг в друга при комплексном сопряжении,

$$\left[\phi^{(-)}(x) \right]^* = \phi^{(+)}(x).$$

Переходя к 4-векторным обозначениям, получим явно ковариантную запись для вещественного скалярного поля

$$\phi(x) = \phi^{(+)}(x) + \phi^{(-)}(x) = \int \frac{d^4k}{(2\pi)^4} \alpha(k) 2\pi \delta(k^2 - m^2c^2/\hbar^2) e^{-ik\cdot x}, \quad (4.31)$$

причем

$$\alpha(-k) = \alpha^*(k),$$

и

$$\delta(k^2 - m^2 c^2 / \hbar^2) = \frac{1}{2|k_0|} \left\{ \delta\left(k_0 - \frac{\omega}{c}\right) + \delta\left(k_0 + \frac{\omega}{c}\right) \right\}.$$

Действие для вещественного скалярного поля может быть представлено в лагранжевом виде

$$S = \int dt L = \int dt \int d^3 \mathbf{x} \frac{1}{2} \left\{ \frac{1}{c^2} \dot{\phi}^2 - (\nabla \phi)^2 - m^2 c^2 \phi^2 \right\}, \quad (4.32)$$

так что функция Лагранжа —

$$L = \frac{1}{2} \int d^3 \mathbf{x} \left\{ \frac{1}{c^2} \dot{\phi}^2 - (\nabla \phi)^2 - m^2 c^2 \phi^2 \right\},$$

а энергия задается гамильтонианом, который получается обычным методом преобразования Лежандра в классической механике,

$$H = \int d^3 \mathbf{x} \dot{\phi}(t, \mathbf{x}) \frac{\delta L}{\delta \dot{\phi}(t, \mathbf{x})} - L = \frac{1}{2} \int d^3 \mathbf{x} \left\{ \frac{1}{c^2} \dot{\phi}^2 + (\nabla \phi)^2 + m^2 c^2 \phi^2 \right\}. \quad (4.33)$$

Интегрирование по координатам \mathbf{x} сводится к интегралу по волновому вектору по следующей схеме:

$$\int d^3 \mathbf{x} f^2(\mathbf{x}) = \int d^3 \mathbf{x} \int \frac{d^3 \mathbf{k}}{(2\pi)^3} \tilde{f}(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \int \frac{d^3 \mathbf{k}'}{(2\pi)^3} \tilde{f}(\mathbf{k}') e^{i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{x}},$$

где Фурье-образ функции —

$$\tilde{f}(\mathbf{k}) = \int d^3 \mathbf{x} f(\mathbf{x}) e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}}.$$

Переставляя порядок интегрирования, с учетом

$$\int d^3 \mathbf{x} e^{i(\mathbf{k} + \mathbf{k}') \cdot \mathbf{x}} = (2\pi)^3 \delta(\mathbf{k} + \mathbf{k}'),$$

находим

$$\int d^3 \mathbf{x} f^2(\mathbf{x}) = \int \frac{d^3 \mathbf{k}}{(2\pi)^3} \tilde{f}(\mathbf{k}) \tilde{f}(-\mathbf{k}).$$

Используя эту процедуру, вычислим энергию волнового пакета свободного скалярного поля

$$E = \frac{1}{2} \int \frac{c^2 d^3 \mathbf{k}}{4\omega^2 (2\pi)^3} \left\{ \left(-\frac{\omega^2}{c^2} + \mathbf{k}^2 + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \right) [e^{-2i\omega t} \alpha(\omega, \mathbf{k}) \alpha(\omega, -\mathbf{k}) + e^{2i\omega t} \alpha^*(\omega, \mathbf{k}) \alpha^*(\omega, -\mathbf{k})] \right. \\ \left. \left(\frac{\omega^2}{c^2} + \mathbf{k}^2 + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \right) [\alpha(\omega, \mathbf{k}) \alpha^*(\omega, \mathbf{k}) + \alpha^*(\omega, \mathbf{k}) \alpha(\omega, \mathbf{k})] \right\}.$$

Осциллирующие со временем вклады зануляются вследствие уравнения движения

$$-\frac{\omega^2}{c^2} + \mathbf{k}^2 + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} = 0.$$

Поэтому окончательно получаем

$$E = \int \hbar \omega \frac{d^3 \mathbf{k}}{2\hbar \omega (2\pi)^3} |\alpha(\omega, \mathbf{k})|^2. \quad (4.34)$$

Отсюда видно, что по своему физическому смыслу величина

$$n_0(\mathbf{k}) = \frac{1}{2\hbar\omega} |\alpha(\omega, \mathbf{k})|^2 \quad (4.35)$$

представляет собой плотность состояний с энергией $\epsilon(\mathbf{k}) = \hbar\omega$ в пространстве волнового вектора. Определим комплексные параметры $\alpha_0(\mathbf{k})$ с нерелятивистской нормировкой

$$\alpha_0(\mathbf{k}) = \frac{1}{\sqrt{2\epsilon(\mathbf{k})}} \alpha(\omega, \mathbf{k}), \quad \Rightarrow \quad n_0(\mathbf{k}) = |\alpha_0(\mathbf{k})|^2. \quad (4.36)$$

В полной аналогии с классическим осциллятором введем пару вещественных канонических переменных: динамическую координату $\mathbf{q}(\mathbf{k})$ и сопряженный ей импульс $\mathbf{p}(\mathbf{k})$:

$$\mathbf{q}(\mathbf{k}) = \frac{1}{\sqrt{2}} \{\alpha_0^*(\mathbf{k}) + \alpha_0(\mathbf{k})\}, \quad \mathbf{p}(\mathbf{k}) = \frac{i}{\sqrt{2}} \{\alpha_0^*(\mathbf{k}) - \alpha_0(\mathbf{k})\}, \quad (4.37)$$

так что

$$|\alpha_0(\mathbf{k})|^2 = \frac{1}{2} \{\mathbf{q}^2(\mathbf{k}) + \mathbf{p}^2(\mathbf{k})\},$$

и гамильтониан для осциллятора с волновым вектором \mathbf{k} —

$$\mathfrak{h}(\mathbf{k}) = \epsilon(\mathbf{k}) \frac{1}{2} \{\mathbf{q}^2(\mathbf{k}) + \mathbf{p}^2(\mathbf{k})\}. \quad (4.38)$$

Тогда энергия вещественного скалярного поля представима в виде суммы гамильтонианов элементарных осцилляторов

$$H = \int \frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \mathfrak{h}(\mathbf{k}). \quad (4.39)$$

Квантование канонической пары $\{\mathbf{q}(\mathbf{k}), \mathbf{p}(\mathbf{k})\}$ эквивалентно введению операторов рождения и уничтожения квантов $\{\mathfrak{a}_0^\dagger(\mathbf{k}), \mathfrak{a}_0(\mathbf{k})\}$ с коммутационным соотношением

$$[\mathfrak{a}_0(\mathbf{k}), \mathfrak{a}_0^\dagger(\mathbf{k}')] = (2\pi)^3 \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}'). \quad (4.40)$$

Это следует из принятой нами нормировки одночастичных состояний в непрерывном спектре:

$$\langle \mathbf{k} | \mathbf{k}' \rangle = (2\pi)^3 \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}'),$$

так как

$$|\mathbf{k}'\rangle = \mathfrak{a}_0^\dagger(\mathbf{k}')|0\rangle, \quad \langle \mathbf{k}| = \langle 0|\mathfrak{a}_0(\mathbf{k}),$$

где $|0\rangle$ — состояние вакуума, для которого как обычно $\mathfrak{a}_0(\mathbf{k})|0\rangle = 0$, и следовательно,

$$\langle \mathbf{k} | \mathbf{k}' \rangle = \langle 0 | \mathfrak{a}_0(\mathbf{k}) \mathfrak{a}_0^\dagger(\mathbf{k}') | 0 \rangle = \langle 0 | [\mathfrak{a}_0(\mathbf{k}), \mathfrak{a}_0^\dagger(\mathbf{k}')] | 0 \rangle = (2\pi)^3 \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}').$$

Вводя когерентные состояния $|\alpha_0(\mathbf{k})\rangle$,

$$\mathfrak{a}_0(\mathbf{k})|\alpha_0(\mathbf{k})\rangle = \alpha_0(\mathbf{k})|\alpha_0(\mathbf{k})\rangle,$$

находим, что классические величины пары канонических переменных задаются средними значениями в когерентном состоянии:

$$\mathbf{q}(\mathbf{k}) = \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{1}{\langle \alpha_0(\mathbf{k}) | \alpha_0(\mathbf{k}) \rangle} \langle \alpha_0(\mathbf{k}) | \left\{ \mathfrak{a}_0^\dagger(\mathbf{k}) + \mathfrak{a}_0(\mathbf{k}) \right\} | \alpha_0(\mathbf{k}) \rangle,$$

$$p(\mathbf{k}) = \frac{i}{\sqrt{2}} \frac{1}{\langle \alpha_0(\mathbf{k}) | \alpha_0(\mathbf{k}) \rangle} \langle \alpha_0(\mathbf{k}) | \{ a_0^\dagger(\mathbf{k}) - a_0(\mathbf{k}) \} | \alpha_0(\mathbf{k}) \rangle.$$

Зависимость операторов рождения от времени дается уравнением Гейзенберга,

$$i\hbar \frac{\partial a(\mathbf{k})}{\partial t} = [a(\mathbf{k}), \hat{h}(\mathbf{k})], \quad a(\mathbf{k})|_{t=0} = a_0(\mathbf{k}), \quad a(\mathbf{k}) = e^{-i\omega t} a_0(\mathbf{k}),$$

где решение легко получить, действуя обеими частями уравнения Гейзенберга на одночастичное состояние $|\mathbf{k}\rangle$, для которого $\hat{h}(\mathbf{k})|\mathbf{k}\rangle = \hbar\omega|\mathbf{k}\rangle$, а энергия вакуума полагается равной нулю $\hat{h}(\mathbf{k})|0\rangle = 0$. Последнее условие выполняется автоматически, если принять *нормальное упорядочивание* операторов для гамильтониана: нормальный символ оператора $: \hat{F} :$ получается перестановкой всех операторов рождения налево от операторов уничтожения, причем каждая операция перестановки операторов из исходного выражения сопровождается умножением на фактор перестановки бозонного или фермионного оператора. Например,

$$: \hat{h}(\mathbf{k}) : = \frac{1}{2} : \{ a_0^\dagger(\mathbf{k}) a_0(\mathbf{k}) + a_0(\mathbf{k}) a_0^\dagger(\mathbf{k}) \} : = a_0^\dagger(\mathbf{k}) a_0(\mathbf{k}).$$

Эта операция позволяет также избавиться от формально бесконечной суммы вакуумных энергий элементарных осцилляторов.

При выводе уравнения Гейзенберга используется оператор сдвигов по времени — оператор эволюции для бесконечно малых преобразований:

$$\hat{U} = 1 - \frac{i}{\hbar} \hat{h} dt,$$

так что, опуская функциональную зависимость от волнового вектора,

$$da = \hat{U}^\dagger a_0 \hat{U} - a_0 = -\frac{i}{\hbar} [a_0, \hat{h}] dt.$$

Совершенно аналогично оператор сдвига по координате — оператор трансляции для бесконечно малых преобразований:

$$\hat{T} = 1 + i \hat{\mathbf{k}} \cdot d\mathbf{x},$$

приводит к зависимости от сдвига координат

$$da = \hat{T}^\dagger a_0 \hat{T} - a_0 = i [a_0, \hat{\mathbf{k}}] \cdot d\mathbf{x}.$$

Отсюда

$$-i \nabla a = [a, \hat{\mathbf{k}}], \quad a|_{x=0} = a_0. \quad (4.41)$$

Решение этого уравнения легко получить, действуя обеими частями равенства на одночастичное состояние $|\mathbf{k}\rangle$ с учетом того, что

$$\hat{\mathbf{k}}|\mathbf{k}\rangle = \mathbf{k}|\mathbf{k}\rangle, \quad \hat{\mathbf{k}}|0\rangle = 0 \quad \Rightarrow \quad [a, \hat{\mathbf{k}}]|\mathbf{k}\rangle = \mathbf{k} a|\mathbf{k}\rangle.$$

Поэтому

$$-i \nabla a = \mathbf{k} a \quad \Rightarrow \quad a = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} a_0.$$

Значит, оператор динамической координаты

$$\hat{q}_0(\mathbf{k}) = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ a_0^\dagger(\mathbf{k}) + a_0(\mathbf{k}) \}$$

приобретает зависимость от времени и координаты в виде

$$\hat{q}(\mathbf{k}) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ e^{ikx} \hat{a}_0^\dagger(\mathbf{k}) + e^{-ikx} \hat{a}_0(\mathbf{k}) \right\}. \quad (4.42)$$

Тогда после перехода к релятивистской нормировке операторов рождения и уничтожения

$$\hat{a}_0 = \frac{1}{\sqrt{2\hbar\omega}} \hat{a} \quad \Rightarrow \quad [\hat{a}(\mathbf{k}), \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}')] = 2\hbar\omega (2\pi)^3 \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}'),$$

усреднение оператора

$$\hat{\phi}(\mathbf{k}) = \frac{c\hbar}{\sqrt{\hbar\omega}} \hat{q}(\mathbf{k}) = \frac{c}{2\omega} \left\{ e^{ikx} \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}) + e^{-ikx} \hat{a}(\mathbf{k}) \right\}$$

по когерентным состояниям

$$\langle \hat{\phi}(\mathbf{k}) \rangle = \frac{1}{\langle \alpha(\mathbf{k}) | \alpha(\mathbf{k}) \rangle} \langle \alpha(\mathbf{k}) | \hat{\phi}(\mathbf{k}) | \alpha(\mathbf{k}) \rangle = \frac{c}{2\omega} \left\{ e^{ikx} \alpha^*(\mathbf{k}) + e^{-ikx} \alpha(\mathbf{k}) \right\}$$

в точности дает классическое поле

$$\phi(x) = \int \frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \langle \hat{\phi}(\mathbf{k}) \rangle.$$

Квантованное поле в релятивистской нормировке имеет вид оператора

$$\hat{\phi}(x) = \int \frac{c d^3\mathbf{k}}{2\omega(2\pi)^3} \left\{ e^{ikx} \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}) + e^{-ikx} \hat{a}(\mathbf{k}) \right\}. \quad (4.43)$$

Подчеркнем, что классическое поле не имеет смысла амплитуды вероятности, т.е. волновой функции. Оно является средним значением оператора квантованного поля по когерентным состояниям. Согласно принципу соответствия, при большом количестве квантов $|\alpha(\mathbf{k})|^2 \gg 1$ флуктуациями их количества можно пренебречь, и мы имеем наблюдаемое классическое поле.

По построению гамильтониан квантованного поля получается из гамильтониана классического поля подстановкой квантованного поля и взятием нормального символа:

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{1}{2} \int d^3\mathbf{x} : \left\{ \frac{1}{c^2} (\dot{\hat{\phi}}(x))^2 + (\nabla \hat{\phi}(x))^2 + m^2 c^2 \hat{\phi}^2(x) \right\} :. \quad (4.44)$$

4.3.1. Фоковское пространство

Состояния, порождаемые действием операторов рождения квантов поля на вакуум, составляют базис фоковского гильбертова пространства в релятивистской квантовой механике свободных вторично квантованных полей.

Релятивистски инвариантная нормировка одночастичных состояний

$$\hat{a}(\mathbf{k})|0\rangle = |\mathbf{k}\rangle,$$

очевидно, имеет вид

$$\langle \mathbf{k} | \mathbf{k}' \rangle = 2\hbar\omega (2\pi)^3 \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}'). \quad (4.45)$$

Поскольку дельта-функция при нулевом значении волнового вектора выражается через объем пространства \mathcal{V} ,

$$(2\pi)^3 \delta(\mathbf{k})|_{\mathbf{k}=0} = \int d^3\mathbf{x} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}|_{\mathbf{k}=0} = \mathcal{V},$$

величина

$$\frac{1}{2\epsilon(\mathbf{k})} \frac{\langle \mathbf{k} | \mathbf{k} \rangle}{\mathcal{V}}$$

имеет смысл нормировки одночастичного состояния в виде 1 частицы на объем всего пространства.

Подчеркнем, что плотность релятивистски нормированных состояний с определенной энергией задается инвариантной величиной

$$\frac{d^3\mathbf{k}}{2\hbar\omega(2\pi)^3} \Rightarrow \mathbb{1} = \int |\mathbf{k}\rangle \frac{d^3\mathbf{k}}{2\hbar\omega(2\pi)^3} \langle \mathbf{k}|,$$

так что состояния из фоковского пространства представляются в виде суперпозиций многочастичных состояний, например,

$$|\Phi\rangle = \int \prod_{i=1}^n \frac{d^3\mathbf{k}_i}{2\hbar\omega_i(2\pi)^3} \Phi(\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_n) |\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_n\rangle.$$

4.3.2. Комплексное поле

Комплексное скалярное поле с массой m является суперпозицией двух вещественных полей $\phi_{1,2}$ с той же массой,

$$\phi(x) = \frac{1}{\sqrt{2}} \{\phi_1(x) + i\phi_2(x)\}, \quad (4.46)$$

так что сумму действий для вещественных компонент можно представить в виде

$$S = \frac{1}{c\hbar^2} \int d^4x \phi^\dagger(x)(p^2 - m^2c^2)\phi(x). \quad (4.47)$$

Выделение в комплексном поле пары динамических вещественных полей (4.46) допускает введение произвольной глобальной комплексной фазы u :

$$\phi_u(x) = e^{-iue/(\hbar c)} \phi(x), \quad (4.48)$$

что, как говорят, определяет калибровочные преобразования поля, оставляющие инвариантным действие. Мы ввели в определение фазы фактор $\frac{e}{\hbar c}$ в том же виде, что и при определении калибровочных преобразований нерелятивистской волновой функции.

Согласно теореме Нётер калибровочной инвариантности действия отвечает сохраняющийся 4-вектор тока

$$\frac{1}{c} j^\mu = \frac{\partial \phi_u^\dagger(x)}{\partial u} \frac{\delta S}{\delta \partial_\mu \phi_u^\dagger(x)} + \frac{\delta S}{\delta \partial_\mu \phi_u(x)} \frac{\partial \phi_u(x)}{\partial u}, \quad \partial_\mu j^\mu = 0. \quad (4.49)$$

Находим

$$j_\mu = i \frac{e}{c\hbar} \{\phi^\dagger \partial_\mu \phi - (\partial_\mu \phi)^\dagger \phi\}. \quad (4.50)$$

Соответствующий сохраняющийся заряд —

$$Q = \int d^3x j_0(x). \quad (4.51)$$

Введем для комплексного квантованного поля операторы, составленные из операторов рождения и уничтожения вещественных полей,

$$\hat{\mathbf{a}}(\mathbf{k}) = \frac{1}{\sqrt{2}}\{\hat{\mathbf{a}}_1(\mathbf{k}) + i\hat{\mathbf{a}}_2(\mathbf{k})\}, \quad \hat{\mathbf{a}}_c^\dagger(\mathbf{k}) = \frac{1}{\sqrt{2}}\{\hat{\mathbf{a}}_1^\dagger(\mathbf{k}) + i\hat{\mathbf{a}}_2^\dagger(\mathbf{k})\}. \quad (4.52)$$

Тогда для этих операторов справедливы следующие коммутационные соотношения:

$$[\hat{\mathbf{a}}(\mathbf{k}), \hat{\mathbf{a}}^\dagger(\mathbf{k}')] = [\hat{\mathbf{a}}_c(\mathbf{k}), \hat{\mathbf{a}}_c^\dagger(\mathbf{k}')] = 2\hbar\omega \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}'), \quad (4.53)$$

$$[\hat{\mathbf{a}}(\mathbf{k}), \hat{\mathbf{a}}_c(\mathbf{k}')] = [\hat{\mathbf{a}}(\mathbf{k}), \hat{\mathbf{a}}_c^\dagger(\mathbf{k}')] = 0. \quad (4.54)$$

Квантованное поле запишется через эти операторы в виде

$$\hat{\phi}(x) = \int \frac{c d^3\mathbf{k}}{2\omega(2\pi)^3} \left\{ e^{ikx} \hat{\mathbf{a}}_c^\dagger(\mathbf{k}) + e^{-ikx} \hat{\mathbf{a}}(\mathbf{k}) \right\}. \quad (4.55)$$

Энергия поля задается гамильтонианом

$$\hat{\mathcal{H}} = \int \frac{d^3\mathbf{k}}{2\hbar\omega(2\pi)^3} \hbar\omega \{ \hat{\mathbf{a}}^\dagger(\mathbf{k})\hat{\mathbf{a}}(\mathbf{k}) + \hat{\mathbf{a}}_c^\dagger(\mathbf{k})\hat{\mathbf{a}}_c(\mathbf{k}) \}. \quad (4.56)$$

В то же время квантованный заряд — это нормальный символ,

$$\hat{Q} = \int d^3x : j_0(x) :, \quad (4.57)$$

который равен

$$\hat{Q} = e \int \frac{d^3\mathbf{k}}{2\hbar\omega(2\pi)^3} \{ \hat{\mathbf{a}}^\dagger(\mathbf{k})\hat{\mathbf{a}}(\mathbf{k}) - \hat{\mathbf{a}}_c^\dagger(\mathbf{k})\hat{\mathbf{a}}_c(\mathbf{k}) \}, \quad (4.58)$$

где осциллирующие со временем вклады сократились.

Полученные выражения для полной энергии и заряда квантованного поля говорят о том, что в пространстве волнового вектора

$$n_+(\mathbf{k}) = \frac{1}{2\hbar\omega} \hat{\mathbf{a}}^\dagger(\mathbf{k})\hat{\mathbf{a}}(\mathbf{k}), \quad n_-(\mathbf{k}) = \frac{1}{2\hbar\omega} \hat{\mathbf{a}}_c^\dagger(\mathbf{k})\hat{\mathbf{a}}_c(\mathbf{k}),$$

— это плотности квантов с зарядом e и $-e$, соответственно, так что в релятивистской нормировке $\hat{\mathbf{a}}^\dagger(\mathbf{k})$ — оператор рождения кванта с зарядом e , а $\hat{\mathbf{a}}_c^\dagger(\mathbf{k})$ — оператор рождения античастицы с зарядом $-e$.

4.3.3. Зарядовое сопряжение

Построим линейный оператор зарядового сопряжения, который оставляет инвариантным вакуум

$$\mathbb{C}|0\rangle = |0\rangle$$

и переводит состояние частицы в состояние античастицы, сохраняя нормировку:

$$\mathbb{C}|\mathbf{k}\rangle = \eta |\mathbf{k}_c\rangle, \quad |\eta| = 1,$$

где

$$|\mathbf{k}\rangle = \hat{\mathbf{a}}^\dagger(\mathbf{k})|0\rangle, \quad |\mathbf{k}_c\rangle = \hat{\mathbf{a}}_c^\dagger(\mathbf{k})|0\rangle.$$

Отсюда легко получить

$$\mathbb{C} \hat{\mathbf{a}}^\dagger(\mathbf{k}) \mathbb{C}^{-1} \mathbb{C}|0\rangle = \eta \hat{\mathbf{a}}_c^\dagger(\mathbf{k})|0\rangle,$$

и наконец, действие зарядового сопряжения на оператор рождения частицы

$$\mathbb{C} \hat{\mathbf{a}}^\dagger(\mathbf{k}) \mathbb{C}^{-1} = \eta \hat{\mathbf{a}}_c^\dagger(\mathbf{k}). \quad (4.59)$$

Поскольку двукратное применение зарядового сопряжения возвращает состояние в исходное с точностью до фазы

$$\mathbb{C}^2 = \xi, \quad |\xi| = 1, \quad \Rightarrow \quad \mathbb{C}^{-2} = \xi^*. \quad (4.60)$$

Тогда из (4.59) следует, что

$$\eta \mathbb{C} \hat{\mathbf{a}}_c^\dagger(\mathbf{k}) \mathbb{C}^{-1} = \hat{\mathbf{a}}^\dagger(\mathbf{k}) \quad \Leftrightarrow \quad \mathbb{C} \hat{\mathbf{a}}_c^\dagger(\mathbf{k}) \mathbb{C}^{-1} = \eta^* \hat{\mathbf{a}}^\dagger(\mathbf{k}).$$

Совершенно аналогично из инвариантности вакуума получаем

$$\mathbb{C} \hat{\mathbf{a}}(\mathbf{k}) \mathbb{C}^{-1} \mathbb{C}|\mathbf{k}\rangle = \mathbb{C} \hat{\mathbf{a}}(\mathbf{k}) \mathbb{C}^{-1} \eta |\mathbf{k}_c\rangle = |0\rangle.$$

Поэтому

$$\mathbb{C} \hat{\mathbf{a}}(\mathbf{k}) \mathbb{C}^{-1} = \eta^* \hat{\mathbf{a}}_c(\mathbf{k}), \quad (4.61)$$

и как следствие,

$$\mathbb{C} \hat{\mathbf{a}}_c(\mathbf{k}) \mathbb{C}^{-1} = \eta \hat{\mathbf{a}}(\mathbf{k}), \quad (4.62)$$

В итоге, очевидно, что зарядовое сопряжение меняет знак заряда \hat{Q} : $\mathbb{C} \hat{Q} \mathbb{C}^{-1} = -\hat{Q}$, оставляя инвариантным гамильтониан. Кроме того, легко заметить, что действие зарядового сопряжения на квантованное поле практически сводится к его эрмитовому сопряжению:

$$\mathbb{C} \hat{\phi}(x) \mathbb{C}^{-1} = \eta^* \hat{\phi}(x)^\dagger. \quad (4.63)$$

При этом, конечно, квантованное действие остается инвариантным.

4.3.4. Инверсия времени

При построении оператора обращения времени

$$t \xrightarrow{\mathbb{T}} t' = -t,$$

необходимо учесть зависимость состояний фоковского пространства от времени. Итак, положим, что инверсия времени сохраняет вакуум

$$\mathbb{T}|0\rangle = |0\rangle$$

и изменяет направление движения на противоположное, так что для одночастичного состояния

$$\mathbb{T}|\mathbf{k}, t\rangle = \zeta |-\mathbf{k}, t'\rangle, \quad \mathbb{T}|\mathbf{k}_c, t\rangle = \zeta_c |-\mathbf{k}_c, t'\rangle, \quad |\zeta| = |\zeta_c| = 1. \quad (4.64)$$

Поскольку в явном виде, например,

$$|\mathbf{k}, t\rangle = e^{-i\omega t} |\mathbf{k}\rangle = e^{-i\omega t} \hat{\mathbf{a}}^\dagger(\mathbf{k})|0\rangle, \quad (4.65)$$

действие оператора \mathbb{T} приводит к

$$\mathbb{T}e^{-i\omega t}\mathbb{T}^{-1}\mathbb{T}\hat{\mathbf{a}}^\dagger(\mathbf{k})\mathbb{T}^{-1}|0\rangle = \zeta e^{-i\omega t'} \hat{\mathbf{a}}^\dagger(-\mathbf{k})|0\rangle.$$

Отсюда выводим, во-первых, что

$$\mathbb{T}\hat{\mathbf{a}}^\dagger(\mathbf{k})\mathbb{T}^{-1} = \zeta \hat{\mathbf{a}}^\dagger(-\mathbf{k}), \quad (4.66)$$

и, во-вторых, вследствие $t' = -t$,

$$\mathbb{T}e^{-i\omega t}\mathbb{T}^{-1} = e^{i\omega t}, \quad (4.67)$$

т.е. оператор обращения времени является *антилинейным*: он переводит число в комплексно сопряженное;

$$\mathbb{T}z\mathbb{T}^{-1} = z^* = \bar{z}.$$

Сохраняющий нормировку состояния антилинейный оператор называется антиунитарным. Действие такого оператора обладает следующими свойствами:

$$\mathbb{T}(c_1|\psi_1\rangle + c_2|\psi_2\rangle) = c_1^*\mathbb{T}|\psi_1\rangle + c_2^*\mathbb{T}|\psi_2\rangle, \quad (4.68)$$

и согласованным с этим образом,

$$\langle\mathbb{T}\Phi|\mathbb{T}\Psi\rangle = \langle\Psi|\Phi\rangle = \langle\Phi|\Psi\rangle^*. \quad (4.69)$$

Эрмитово сопряженный оператор для антилинейного определяется соотношением

$$\langle\Phi|\mathbb{T}\Psi\rangle = \langle\Psi|\mathbb{T}^\dagger\Phi\rangle. \quad (4.70)$$

Далее тем же способом, что и при построении соотношений для оператора зарядового сопряжения, находим с учетом антилинейности оператора инверсии времени

$$\mathbb{T}\hat{\mathbf{a}}(\mathbf{k})\mathbb{T}^{-1} = \zeta^* \hat{\mathbf{a}}(-\mathbf{k}), \quad \mathbb{T}\hat{\mathbf{a}}_c^\dagger(\mathbf{k})\mathbb{T}^{-1} = \zeta_c \hat{\mathbf{a}}_c^\dagger(-\mathbf{k}), \quad \mathbb{T}\hat{\mathbf{a}}_c(\mathbf{k})\mathbb{T}^{-1} = \zeta_c^* \hat{\mathbf{a}}_c(-\mathbf{k}). \quad (4.71)$$

Тогда в силу

$$\begin{aligned} \mathbb{T}\hat{\mathbf{a}}^\dagger(\mathbf{k})\hat{\mathbf{a}}(\mathbf{k})\mathbb{T}^{-1} &= \hat{\mathbf{a}}^\dagger(-\mathbf{k})\hat{\mathbf{a}}(-\mathbf{k}), \\ \mathbb{T}\hat{\mathbf{a}}_c^\dagger(\mathbf{k})\hat{\mathbf{a}}_c(\mathbf{k})\mathbb{T}^{-1} &= \hat{\mathbf{a}}_c^\dagger(-\mathbf{k})\hat{\mathbf{a}}_c(-\mathbf{k}), \end{aligned} \quad (4.72)$$

гамильтониан $\hat{\mathcal{H}}$ и заряд поля \hat{Q} останутся эрмитовыми операторами, и они остаются инвариантными при обращении стрелы времени, как этого и следовало ожидать.

Действие оператора инверсии времени на квантовое поле

$$\begin{aligned} \mathbb{T}\hat{\phi}(t, \mathbf{x})\mathbb{T}^{-1} &= \int \frac{c d^3\mathbf{k}}{2\omega(2\pi)^3} \left\{ e^{-i(\omega t - \mathbf{k}\cdot\mathbf{x})} \zeta_c \hat{\mathbf{a}}_c^\dagger(-\mathbf{k}) + e^{i(\omega t - \mathbf{k}\cdot\mathbf{x})} \zeta^* \hat{\mathbf{a}}(-\mathbf{k}) \right\} = \\ &= \int \frac{c d^3\mathbf{k}}{2\omega(2\pi)^3} \left\{ e^{i(-\omega t - \mathbf{k}\cdot\mathbf{x})} \zeta_c \hat{\mathbf{a}}_c^\dagger(\mathbf{k}) + e^{-i(-\omega t - \mathbf{k}\cdot\mathbf{x})} \zeta^* \hat{\mathbf{a}}(\mathbf{k}) \right\} \end{aligned}$$

можно свести к

$$\mathbb{T}\hat{\phi}(t, \mathbf{x})\mathbb{T}^{-1} = \zeta^* \hat{\phi}(-t, \mathbf{x}),$$

только если

$$\zeta^* = \zeta_c. \quad (4.73)$$

Тогда и квантовое действие свободного комплексного скалярного поля останется инвариантным относительно инверсии времени.

4.3.5. Инверсия пространства

Зеркальное отражение пространства

$$\mathbf{x} \xrightarrow{\mathbb{P}} -\mathbf{x},$$

в квантовой механике свободной релятивистской скалярной частицы соответствует линейному оператору, сохраняющему вакуум

$$\mathbb{P}|0\rangle = |0\rangle \quad (4.74)$$

и преобразующему, например, одночастичное состояние, сохраняя его норму:

$$\mathbb{P}|\mathbf{k}\rangle = \xi|-\mathbf{k}\rangle, \quad |\xi| = 1, \quad (4.75)$$

и аналогично для античастицы.

Тогда та же схема рассуждений, что и в двух предыдущих разделах, приводит к следующим соотношениям:

$$\mathbb{P}\hat{\mathbf{a}}^\dagger(\mathbf{k})\mathbb{P}^{-1} = \xi\hat{\mathbf{a}}^\dagger(-\mathbf{k}), \quad (4.76)$$

$$\mathbb{P}\hat{\mathbf{a}}(\mathbf{k})\mathbb{P}^{-1} = \xi^*\hat{\mathbf{a}}(-\mathbf{k}), \quad (4.77)$$

$$\mathbb{P}\hat{\mathbf{a}}_c^\dagger(\mathbf{k})\mathbb{P}^{-1} = \xi_c\hat{\mathbf{a}}_c^\dagger(-\mathbf{k}), \quad (4.78)$$

$$\mathbb{P}\hat{\mathbf{a}}_c(\mathbf{k})\mathbb{P}^{-1} = \xi_c^*\hat{\mathbf{a}}_c(-\mathbf{k}). \quad (4.79)$$

Поле преобразуется согласно

$$\mathbb{P}\hat{\phi}(t, \mathbf{x})\mathbb{P}^{-1} = \xi^* \hat{\phi}(t, -\mathbf{x}), \quad (4.80)$$

если

$$\xi^* = \xi_c, \quad (4.81)$$

что дает также инвариантность действия.

Лекция № 5

Уравнения движения для киральных безмассовых спиноров Вейля, действие кирального поля, гамильтониан и заряд, базисные спиноры и квантование вейлевского спинора, античастицы с противоположной спиральностью и CP -инвариантность, инверсия времени, безмассовый биспинор Дирака и операция пространственной инверсии, гамма-матрицы и их алгебра, киральные проекторы, дираковски сопряженный спинор, зарядовое сопряжение биспинора, дираковский спинор с массой, уравнение Дирака, квантование, проекторы на состояния с заданным значением спина, сумма по поляризациям, представление Дирака для гамма-матриц, дискретные симметрии для поля Дирака, зарядово самосопряженные спиноры Майорана, майорановская масса.

5.1. Вейлевские спиноры

Правое киральное безмассовое поле $\bar{\chi}^{\dot{\alpha}}(x)$, преобразующееся по представлению $(\frac{1}{2}, 0)$ группы $SL(2, \mathbb{C})$, согласно общему формализму удовлетворяет уравнению

$$\mathfrak{s} p^k \bar{\chi} = \frac{1}{\hbar} W^k \bar{\chi},$$

где спиральность $\mathfrak{s} = \frac{1}{2}$, а оператор W^k задается покомпонентно, так что для временной компоненты

$$\frac{1}{\hbar} W^0 = \frac{1}{2} \mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\sigma},$$

а уравнения для пространственных компонент, как мы показали, являются следствием заданного представления для безмассового поля. В явном виде, уравнение для p_0 принимает вид

$$p_0 \bar{\chi} = \mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\sigma} \bar{\chi}, \quad (5.1)$$

или с учетом определения 4-вектора сигма-матриц

$$p_k \sigma^k \bar{\chi} = 0 \quad \Leftrightarrow \quad p_k \sigma_{\alpha\dot{\alpha}}^k \bar{\chi}^{\dot{\alpha}} = 0. \quad (5.2)$$

Уравнение (5.1) может быть представлено как “релятивистское уравнение Шредингера” для правого кирального фермиона

$$i\hbar \frac{\partial \bar{\chi}}{\partial t} = \mathcal{H}_R \bar{\chi}, \quad \mathcal{H}_R = c \mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\sigma}, \quad (5.3)$$

причем “гамильтониан” \mathcal{H}_R — эрмитов оператор.

С учетом того, что $(\bar{\chi}^{\dot{\alpha}})^{\dagger} = \chi^{\alpha}$, уравнение (5.2) может быть получено вариацией действия

$$S_R = \int d^4x \{ \chi p_k \sigma^k \bar{\chi} \} \quad (5.4)$$

по χ^{α} , причем, как мы видели, это действие является релятивистским инвариантом.

Выписывая обобщенный импульс

$$\frac{\delta L_R}{\delta \dot{\chi}(x)} = i\hbar \chi \sigma^0,$$

находим гамильтониан классического поля

$$H_R = \int d^3\mathbf{x} \{ i\hbar \chi \sigma^0 \dot{\chi} - c \chi p_k \sigma^k \bar{\chi} \} = c \int d^3\mathbf{x} \{ \chi \mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\sigma} \bar{\chi} \}.$$

Глобальные калибровочные преобразования

$$\bar{\chi}_u = e^{-iu \frac{e}{\hbar c}} \bar{\chi} \quad (5.5)$$

определяют сохраняющийся ток

$$\frac{1}{c} j^k = \frac{\delta S_R}{\delta \partial_k \bar{\chi}_u} \frac{\partial \bar{\chi}_u}{\partial u} = \frac{e}{c} \chi \sigma^k \bar{\chi}$$

и заряд

$$Q = \int d^3 \mathbf{x} j^0(x) = e \int d^3 \mathbf{x} \{ \chi \sigma^0 \bar{\chi} \}.$$

Найдем решения уравнения для спинора (5.1) в импульсном представлении, т.е. в виде плоской волны

$$\bar{\chi}(x) = e^{-\frac{i}{\hbar} p \cdot x} \sum_{\lambda} \bar{\chi}_{(\lambda)}(\mathbf{p}),$$

где

$$p \cdot x = p_0 x_0 - \mathbf{p} \cdot \mathbf{x}.$$

Как нам известно, матрица

$$\mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\sigma} = \sigma_p$$

имеет пару собственных векторов-столбцов, так что в их базисе

$$\mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\sigma} = |\mathbf{p}| \sigma_3 = |\mathbf{p}| \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

и, принимая условие нормировки $\bar{\chi}^\dagger \bar{\chi} = 2 |\mathbf{p}|$,

$$\begin{aligned} \bar{\chi}(\mathbf{p}) &= \sqrt{2|\mathbf{p}|} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, & \mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\sigma} \bar{\chi}(\mathbf{p}) &= |\mathbf{p}| \bar{\chi}(\mathbf{p}), \\ \bar{\chi}_{cp}(\mathbf{p}) &= \sqrt{2|\mathbf{p}|} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, & -\mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\sigma} \bar{\chi}_{cp}(-\mathbf{p}) &= |\mathbf{p}| \bar{\chi}_{cp}(-\mathbf{p}), \end{aligned}$$

где сопряжение

$$\bar{\chi}_{cp}(-\mathbf{p}) = -i\sigma_2 \bar{\chi}^*(\mathbf{p})$$

дает левый спинор-столбец. Формально спинор $\bar{\chi}_{cp}(-\mathbf{p})$ отвечает правому спинору при проекции спина на импульс $-\mathbf{p}$ и соответствует отрицательно-частотным решениям $p_0 = -|\mathbf{p}|$. Меняя знак 4-импульса, приходим к левому спинору $\bar{\chi}_{cp}(\mathbf{p})$ с положительной энергией.

В итоге, разложение классического правого спинорного поля по модам принимает вид

$$\bar{\chi}(x) = \int \frac{d^3 \mathbf{p}}{2p_0 (2\pi\hbar)^3} \left\{ e^{-\frac{i}{\hbar} p \cdot x} \bar{\chi}(\mathbf{p}) \vartheta(\mathbf{p}) + e^{\frac{i}{\hbar} p \cdot x} \bar{\chi}_{cp}(\mathbf{p}) \bar{v}(\mathbf{p}) \right\}, \quad (5.6)$$

где уже энергия p_0 принимает только положительные значения

$$p_0 = |\mathbf{p}|, \quad p \cdot x = p_0 x_0 - \mathbf{p} \cdot \mathbf{x},$$

а $\vartheta(\mathbf{p})$ и $v(\mathbf{p})$ — комплекснозначные параметры.

С учетом ортогональности базисных спиноров находим для гамильтониана

$$H_R = \int \varepsilon(\mathbf{p}) \frac{d^3\mathbf{p}}{2p_0 (2\pi\hbar)^3} \{ \bar{\vartheta}(\mathbf{p}) \vartheta(\mathbf{p}) - v(\mathbf{p}) \bar{v}(\mathbf{p}) \}, \quad (5.7)$$

где $\varepsilon(\mathbf{p}) = c|\mathbf{p}| = cp_0 > 0$ — положительно определенная энергия спинорной моды. Аналогично, заряд классического поля

$$Q = e \int \frac{d^3\mathbf{p}}{2p_0 (2\pi\hbar)^3} \{ \bar{\vartheta}(\mathbf{p}) \vartheta(\mathbf{p}) + v(\mathbf{p}) \bar{v}(\mathbf{p}) \}. \quad (5.8)$$

Классические выражения для гамильтониана и заряда допускают логически не противоречивую интерпретацию, если параметры $\vartheta(\mathbf{p})$ и $v(\mathbf{p})$ являются грассмановыми переменными, так как только в этом случае гамильтониан является положительно определенной величиной: можно ввести соответствующие плотности гамильтониана в импульсном пространстве для спинорных мод

$$\mathfrak{h}_R(\mathbf{p}) = \frac{\varepsilon(\mathbf{p})}{2p_0} \bar{\vartheta}(\mathbf{p}) \vartheta(\mathbf{p}) \geq 0, \quad (5.9)$$

$$\mathfrak{h}_R^{cp}(\mathbf{p}) = \frac{\varepsilon(\mathbf{p})}{2p_0} \bar{v}(\mathbf{p}) v(\mathbf{p}) \geq 0, \quad (5.10)$$

поскольку для грассмановых переменных

$$\bar{v}(\mathbf{p}) v(\mathbf{p}) = -v(\mathbf{p}) \bar{v}(\mathbf{p}),$$

так что величины

$$n_0(\mathbf{p}) = \frac{1}{2p_0} \bar{\vartheta}(\mathbf{p}) \vartheta(\mathbf{p}), \quad (5.11)$$

$$n_0^{cp}(\mathbf{p}) = \frac{1}{2p_0} \bar{v}(\mathbf{p}) v(\mathbf{p}), \quad (5.12)$$

определяют соответственно плотности состояний правых спиноров и CP -сопряженных к ним спиноров, обладающих левой спиральностью и противоположным значением заряда, так как

$$Q = e \int \frac{d^3\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} \{ n_0(\mathbf{p}) - n_0^{cp}(\mathbf{p}) \}. \quad (5.13)$$

Квантованное правое спинорное поле — правый вейлевский спинор — запишем в виде

$$\hat{\chi}(x) = \int \frac{d^3\mathbf{p}}{2p_0 (2\pi\hbar)^3} \left\{ e^{-\frac{i}{\hbar} p \cdot x} \bar{\chi}(\mathbf{p}) \mathbf{a}_R(\mathbf{p}) + e^{\frac{i}{\hbar} p \cdot x} \bar{\chi}_{cp}(\mathbf{p}) \mathbf{a}_{L,cp}^\dagger(\mathbf{p}) \right\}, \quad (5.14)$$

где $\mathbf{a}_{L,cp}^\dagger$ — оператор рождения квантов античастиц (заряд $-e$) с отрицательной киральностью, а \mathbf{a}_R — оператор уничтожения квантов с положительной спиральностью (заряд $+e$), причем имеют место антикоммутиационные соотношения, характерные для фермионов

$$\begin{aligned} \{ \mathbf{a}_{L,cp}(\mathbf{p}), \mathbf{a}_{L,cp}^\dagger(\mathbf{p}') \} &= 2p_0 (2\pi\hbar)^3 \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}'), \\ \{ \mathbf{a}_R(\mathbf{p}), \mathbf{a}_R^\dagger(\mathbf{p}') \} &= 2p_0 (2\pi\hbar)^3 \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}'), \end{aligned} \quad (5.15)$$

в то время как другие антикоммутируют, обращаются в нуль, например,

$$\{\mathbf{a}_{L,cp}(\mathbf{p}), \mathbf{a}_{L,cp}(\mathbf{p}')\} = \{\mathbf{a}_R(\mathbf{p}), \mathbf{a}_{L,cp}(\mathbf{p}')\} = \{\mathbf{a}_R(\mathbf{p}), \mathbf{a}_{L,cp}^\dagger(\mathbf{p}')\} = \{\mathbf{a}_{L,cp}(\mathbf{p}), \mathbf{a}_R^\dagger(\mathbf{p}')\} = 0. \quad (5.16)$$

Усреднение операторов по когерентным состояниям фермионного осциллятора

$$\mathbf{a}_{L,cp}(\mathbf{p})|v(\mathbf{p})\rangle = v(\mathbf{p})|v(\mathbf{p})\rangle, \quad \mathbf{a}_R(\mathbf{p})|\vartheta(\mathbf{p})\rangle = \vartheta(\mathbf{p})|\vartheta(\mathbf{p})\rangle,$$

дает классические фурье-компоненты поля:

$$\frac{1}{\langle v(\mathbf{p})|v(\mathbf{p})\rangle} \langle v(\mathbf{p})|\mathbf{a}_{L,cp}^\dagger(\mathbf{p})|v(\mathbf{p})\rangle = \bar{v}(\mathbf{p}),$$

$$\frac{1}{\langle \vartheta(\mathbf{p})|\vartheta(\mathbf{p})\rangle} \langle \vartheta(\mathbf{p})|\mathbf{a}_R(\mathbf{p})|\vartheta(\mathbf{p})\rangle = \vartheta(\mathbf{p}).$$

Квантование приводит к положительно определенным гамильтонианам

$$\hat{\mathbf{h}}_R(\mathbf{p}) = \frac{\varepsilon(\mathbf{p})}{2p_0} \mathbf{a}_R^\dagger(\mathbf{p}) \mathbf{a}_R(\mathbf{p}) \quad \text{и} \quad \hat{\mathbf{h}}_L^{\text{cp}}(\mathbf{p}) = \frac{\varepsilon(\mathbf{p})}{2p_0} \mathbf{a}_{L,cp}^\dagger(\mathbf{p}) \mathbf{a}_{L,cp}(\mathbf{p}). \quad (5.17)$$

Выражение для квантованного заряда достаточно очевидно.

Повторяя ту же процедуру для левых вейлевских спиноров-столбцов θ_α , которые удовлетворяют уравнению

$$p_k \bar{\sigma}^k \theta = 0 \quad \Leftrightarrow \quad p_k (\bar{\sigma}^k)^{\dot{\alpha}\alpha} \theta_\alpha = 0, \quad (5.18)$$

находим действие

$$S_L = \int d^4x \{ \bar{\theta} p_k \bar{\sigma}^k \theta \} \quad (5.19)$$

и квантованное поле

$$\hat{\theta}(x) = \int \frac{d^3\mathbf{p}}{2p_0 (2\pi\hbar)^3} \left\{ e^{-\frac{i}{\hbar} p \cdot x} \theta(\mathbf{p}) \mathbf{a}_L(\mathbf{p}) + e^{\frac{i}{\hbar} p \cdot x} \theta_{cp}(\mathbf{p}) \mathbf{a}_{R,cp}^\dagger(\mathbf{p}) \right\}, \quad (5.20)$$

где $\mathbf{a}_{R,cp}^\dagger$ — оператор рождения квантов античастиц (заряд $-e$) с положительной киральностью, а \mathbf{a}_L — оператор уничтожения квантов с отрицательной спиральностью (заряд $+e$), причем имеют место стандартные антикоммутационные соотношения для фермионных (грассмановых) операторов.

Действие дискретных симметрий на состояния фоковского пространства для вейлевских спиноров обладает существенными отличиями от их действия на состояния скалярных частиц. В самом деле, унитарная операция зарядового сопряжения сохраняет киральность частицы, но существует лишь одно состояние с заданной спиральностью и положительной энергией. Пространственная инверсия меняет спиральность частицы, так что она переводит правые спинорные поля в левые и обратно, но при этом остается неизменным знак заряда, что, как мы видели, не согласуется с последовательным квантованием кирального поля. Это означает, что *действие одного кирального поля с определенной спиральностью принципиально не может быть инвариантно относительно C или P -сопряжения по отдельности*.

Рассмотрим операцию комбинированной четности CP , изменяющей спиральность, на примере правого кирального поля. Установленные нами свойства импульса, энергии и спиральности означают, что

$$CP \mathbf{a}_R^\dagger(\mathbf{p}) (CP)^{-1} = \eta_{CP} \mathbf{a}_{L,cp}^\dagger(-\mathbf{p}), \quad (5.21)$$

где $|\eta_{CP}| = 1$, и, как следствие процедуры, повторяющей рассмотрение для скалярных полей,

$$\mathbb{CP} \mathbf{a}_R(\mathbf{p}) (\mathbb{CP})^{-1} = \eta_{CP}^* \mathbf{a}_{L,cp}(-\mathbf{p}). \quad (5.22)$$

Такое сопряжение оставляет инвариантным гамильтониан и меняет знак заряда поля (операторы плотности частиц и античастиц меняются местами). Сопряженное свободное поле должно удовлетворять исходному уравнению движения (5.2). Поэтому сопряжение операторов рождения и уничтожения (5.21), (5.22) с необходимостью сопровождается и сопряжением спиноров-столбцов с помощью линейного матричного оператора, так что

$$\begin{aligned} \bar{\chi}(\mathbf{p}) &\xrightarrow{\mathbb{CP}} -i\sigma_2 \bar{\chi}^*(\mathbf{p}) = \bar{\chi}_{cp}(-\mathbf{p}) = \chi(-\mathbf{p}), \\ \bar{\chi}_{cp}(\mathbf{p}) = \chi(\mathbf{p}) &\xrightarrow{\mathbb{CP}} -i\sigma_2 \bar{\chi}_{cp}^*(\mathbf{p}) = -\bar{\chi}(-\mathbf{p}). \end{aligned}$$

Значит, CP -преобразование поля дает

$$\begin{aligned} \hat{\chi}_{cp}(t, \mathbf{x}) &= \mathbb{CP} \hat{\chi}(x) (\mathbb{CP})^{-1} \\ &= \int \frac{d^3\mathbf{p}}{2p_0(2\pi\hbar)^3} \left\{ \eta_{CP}^* e^{-\frac{i}{\hbar}\mathbf{p} \cdot \mathbf{x}} \chi(-\mathbf{p}) \mathbf{a}_{L,cp}(-\mathbf{p}) - \eta_{CP}^* e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{p} \cdot \mathbf{x}} \bar{\chi}(-\mathbf{p}) \mathbf{a}_R^\dagger(-\mathbf{p}) \right\}. \end{aligned} \quad (5.23)$$

В итоге, можно записать

$$\hat{\chi}_{cp}(t, \mathbf{x}) = -\eta_{CP}^* i\sigma_2 \hat{\chi}^*(t, -\mathbf{x}), \quad (5.24)$$

где операция $\hat{\chi}^*$ означает комплексное сопряжение для комплексных чисел и эрмитово сопряжение для операторов рождения и уничтожения. Из явного вида сопряженного поля (5.23) следует, что оно, конечно, удовлетворяет исходному уравнению движения, но соответствует квантам с противоположным значением заряда. Подчеркнем также, что *действие киральных спиноров инвариантно относительно операции CP* (5.24): действительно, поскольку для спиноров-столбцов

$$\chi_{cp} = (\bar{\chi}_{cp})^\dagger = \eta_{CP} \bar{\chi}^T i\sigma_2,$$

находим

$$\chi_{cp} p_k \sigma^k \bar{\chi}_{cp} = -\bar{\chi}^T i\sigma_2 p_k \sigma^k i\sigma_2 \bar{\chi}^* = \bar{\chi}^T \mathcal{P}_k^n p_n (\sigma^k)^T \bar{\chi}^* = \{\bar{\chi}^T \mathcal{P}_k^n p_n (\sigma^k)^T \bar{\chi}^*\}^T = \chi \mathcal{P}_k^n p_n \sigma^k \bar{\chi},$$

так что замена переменных интегрирования в действии согласно операции пространственной инверсии

$$x^k = \mathcal{P}_n^k x^n,$$

оставляет действие кирального спинора инвариантным.

Антилинейная операция обращения стрелы времени сохраняет спиральность, энергию и обращает импульс, так что, следуя процедуре, разработанной для скалярных полей, находим

$$\begin{aligned} \mathbb{T} \mathbf{a}_R^\dagger(\mathbf{p}) \mathbb{T}^{-1} &= \zeta \mathbf{a}_R^\dagger(-\mathbf{p}), & \mathbb{T} \mathbf{a}_R(\mathbf{p}) \mathbb{T}^{-1} &= \zeta^* \mathbf{a}_R(-\mathbf{p}), \\ \mathbb{T} \mathbf{a}_{L,cp}^\dagger(\mathbf{p}) \mathbb{T}^{-1} &= \zeta_{CP} \mathbf{a}_{L,cp}^\dagger(-\mathbf{p}), & \mathbb{T} \mathbf{a}_{L,cp}(\mathbf{p}) \mathbb{T}^{-1} &= \zeta_{CP}^* \mathbf{a}_{L,cp}(-\mathbf{p}), \end{aligned} \quad (5.25)$$

где $|\zeta| = |\zeta_{CP}| = 1$. Тогда гамильтониан сохраняется вещественным, а заряд остается инвариантным, как этого и следовало ожидать.

Квантованное поле преобразуется по закону

$$\mathbb{T} \hat{\chi}(t, \mathbf{x}) \mathbb{T}^{-1} = -\zeta^* \mathbf{i} \sigma_2 \hat{\chi}^*(-t, \mathbf{x}), \quad (5.26)$$

причем необходимо положить $\zeta_{\text{CP}} = \zeta^*$. Легко показать, что действие свободного кирального поля инвариантно относительно операции обращения стрелы времени.

Обобщая экспериментальные данные, Ландау, а также, независимо от него, Ли и Янг предложили рассматривать нейтрино, участвующие в слабых взаимодействиях, в качестве левых вейлевских спиноров.

Подчеркнем, что вейлевские спиноры с необходимостью обладают зарядом, но обязательно электрическим, обусловленным калибровочной инвариантностью преобразования фазы комплексного числа, т.е. симметрией по отношению к группе $U(1)$. В частности, нейтрино являются электрически нейтральными, но они несут заряд электрослабой группы $SU(2)$, в которой нейтрино представляет собой компоненту дублета (спинора) по слабому изоспину.

5.2. Дираковские спиноры

5.2.1. Безмассовое поле

Поскольку пространственная инверсия меняет знак спиральности безмассового поля, сохраняя его заряд, а зарядовое сопряжение сохраняет спиральность, изменяя знак заряда, свободное спинорное поле, действие которого симметрично относительно операций пространственной и зарядовой четности по отдельности, с необходимостью должно включать в себя как левые так и правые спиноры одного знака, и следовательно, такое поле преобразуется относительно группы $SL(2, \mathbb{C})$ как прямая сумма (расширенный столбец)

$$\left(\frac{1}{2}, 0\right) \oplus \left(0, \frac{1}{2}\right) = \begin{pmatrix} \bar{\chi}^{\dot{\alpha}} \\ \theta_{\alpha} \end{pmatrix} = \psi_D, \quad (5.27)$$

т.е. *дираковский биспинор* имеет индексы и правого, и левого спиноров. Такой безмассовый биспинор, очевидно, удовлетворяет системе уравнений

$$\begin{cases} p_k \bar{\sigma}^k \theta = 0, \\ p_k \sigma^k \bar{\chi} = 0, \end{cases} \quad (5.28)$$

которая получается из действия

$$S_D = \int d^4x (\chi p_k \sigma^k \bar{\chi} + \bar{\theta} p_k \bar{\sigma}^k \theta). \quad (5.29)$$

Уравнения движения в терминах дираковского спинора можно также записать в виде

$$\not{p} \psi_D = \begin{pmatrix} 0 & p_k \bar{\sigma}^k \\ p_k \sigma^k & 0 \end{pmatrix} \psi_D = 0, \quad (5.30)$$

где матрица \not{p} понимается в блочном смысле. Она переводит биспинор в биспинор, так как

$$\begin{aligned} p_k (\bar{\sigma}^k)^{\dot{\alpha}\alpha} \theta_{\alpha} & \quad \text{— правый спинор,} \\ p_k \sigma_{\alpha\dot{\alpha}}^k \bar{\chi}^{\dot{\alpha}} & \quad \text{— левый спинор.} \end{aligned}$$

Обычно вводят блочные матрицы Дирака в киральном представлении

$$\gamma_0 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\gamma} = \begin{pmatrix} 0 & -\boldsymbol{\sigma} \\ \boldsymbol{\sigma} & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \boldsymbol{\sigma}. \quad (5.31)$$

Тогда

$$\not{p} = p_k \gamma^k = p_0 \gamma_0 - \mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\gamma}. \quad (5.32)$$

Безмассовый биспинор имеет два собственных состояния киральности

$$\gamma_5 \psi_D = \pm \psi_D, \quad (5.33)$$

где в киральном представлении

$$\gamma_5 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Если обозначить матрицы Паули, образующие блоки⁴, символом $\boldsymbol{\tau}$, чтобы не путать их с $\boldsymbol{\sigma}$ -матрицами в группе $SL(2, \mathbb{C})$, то, очевидно,

$$\gamma_0 = \boldsymbol{\tau}_1, \quad \gamma_5 = \boldsymbol{\tau}_3,$$

и для полноты базиса

$$\gamma_0 \gamma_5 = -i \boldsymbol{\tau}_2,$$

так что

$$\boldsymbol{\gamma} = \gamma_0 \gamma_5 \boldsymbol{\sigma}.$$

Тогда 4-вектор гамма-матриц Дирака с учетом различия верхних и нижних спинорных индексов с точками и без точек запишется в виде

$$(\gamma_0, \boldsymbol{\gamma}) = \gamma^k = \tau_+ \otimes \bar{\sigma}^k + \tau_- \otimes \sigma^k, \quad (5.34)$$

где $\tau_{\pm} = (\boldsymbol{\tau}_1 \pm i \boldsymbol{\tau}_2)/2$. Произведения

$$\tau_+ \tau_- = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \tau_- \tau_+ = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix},$$

образуют проекторы на киральные состояния

$$P_{R,L} = \frac{1}{2}(1 \pm \gamma_5), \quad (5.35)$$

причем

$$P_R^2 = P_R, \quad P_L^2 = P_L, \quad P_R + P_L = 1.$$

Тогда, используя антикоммутиационные соотношения для сигма-матриц, мгновенно находим

$$\{\gamma^m, \gamma^n\} = 2g^{mn}, \quad (5.36)$$

а с помощью коммутатора вводим дираковские матрицы $\hat{\sigma}^{mn}$,

$$\frac{i}{4} [\gamma^m, \gamma^n] = P_R \bar{\sigma}^{mn} + P_L \sigma^{mn} = \begin{pmatrix} \bar{\sigma}^{mn} & 0 \\ 0 & \sigma^{mn} \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \hat{\sigma}^{mn}, \quad (5.37)$$

⁴Умножение блочных матриц с точки зрения математической грамотности принято записывать в виде *прямого произведения* обычных, не блочных, матриц: $\boldsymbol{\tau}_k \boldsymbol{\sigma}^l \leftrightarrow \boldsymbol{\tau}_k \otimes \boldsymbol{\sigma}^l$.

которые, очевидно, образуют представление спинных генераторов группы Лоренца на дираковских спинорах.

Отметим, что согласно алгебре матриц Паули

$$\gamma_0^2 = \gamma_5^2 = -\gamma_\rho^2 = 1, \quad \{\gamma_5, \gamma^n\} = 0, \quad \rho = \{\overline{1, 3}\}, \quad n = \{\overline{0, 3}\},$$

где нет суммирования по ρ .

Произвольный элемент группы Лоренца на дираковских спинорах по их построению имеет вид

$$\Lambda = \begin{pmatrix} \Lambda_+ & 0 \\ 0 & \Lambda_- \end{pmatrix},$$

а обратный элемент

$$\Lambda^{-1} = \begin{pmatrix} \Lambda_+^{-1} & 0 \\ 0 & \Lambda_-^{-1} \end{pmatrix}$$

может быть представлен в виде

$$\Lambda^{-1} = \begin{pmatrix} \Lambda_-^\dagger & 0 \\ 0 & \Lambda_+^\dagger \end{pmatrix} = \gamma_0 \Lambda^\dagger \gamma_0.$$

Поэтому *дираковски сопряженный спинор*

$$\bar{\psi}_D \stackrel{\text{def}}{=} \psi_D^\dagger \gamma_0 \quad (5.38)$$

преобразуется обратной матрицей. Используя это свойство и расписывая билинейные комбинации дираковских спиноров через вейлевские, получаем трансформационные свойства для следующих величин (опуская индекс D для дираковских спиноров):

$$\begin{aligned} \bar{\psi} \psi &= \bar{\theta} \bar{\chi} + \chi \theta, & \text{— скаляр,} \\ \bar{\psi} \gamma^m \psi &= \chi \sigma^m \bar{\chi} + \bar{\theta} \bar{\sigma}^m \theta, & \text{— вектор,} \\ \frac{1}{2} \bar{\psi} \hat{\sigma}^{mn} \psi &= \bar{\theta} \bar{\sigma}^{mn} \bar{\chi} + \chi \sigma^{mn} \theta, & \text{— антисимметричный тензор.} \end{aligned} \quad (5.39)$$

Действие оператора пространственной инверсии изменяет спиральность, так что

$$\bar{\chi}^{\dot{\alpha}} \xleftrightarrow{\mathbb{P}} \theta_\alpha, \quad \chi^\alpha \xleftrightarrow{\mathbb{P}} \bar{\theta}_{\dot{\alpha}},$$

и

$$\mathfrak{s} \xleftrightarrow{\mathbb{P}} -\mathfrak{s}, \quad P_L \xleftrightarrow{\mathbb{P}} P_R, \quad \gamma_5 \xleftrightarrow{\mathbb{P}} -\gamma_5.$$

При этом фазы преобразования спиноров можно определить таким образом, что операция инверсии запишется в виде⁵

$$\psi^{\mathbb{P}}(t, \mathbf{x}) = \gamma_0 \psi(t, -\mathbf{x}), \quad (5.40)$$

причем, как и должно быть,

$$\gamma_0 \gamma_5 = -\gamma_5 \gamma_0.$$

⁵В самом деле, матрица преобразования в общем виде запишется в виде $\xi_{\mathbb{P}} \begin{pmatrix} 0 & e^{iu} \\ e^{-iu} & 0 \end{pmatrix}$, но фазы u можно занулить, переопределяя глобальные комплексные фазы киральных спиноров Вейля.

Тогда легко заметить, что следующие билинейные комбинации преобразуются как псевдовеличины:

$$\begin{aligned}\bar{\psi} \gamma_5 \psi &= \bar{\theta} \bar{\chi} - \chi \theta, & \text{— псевдоскаляр,} \\ \bar{\psi} \gamma_5 \gamma^m \psi &= \chi \sigma^m \bar{\chi} - \bar{\theta} \bar{\sigma}^m \theta, & \text{— псевдовектор.}\end{aligned}\tag{5.41}$$

Поскольку шестнадцать матриц

$$(1, \gamma_5, \gamma^m, \gamma_5 \gamma^m, \hat{\sigma}^{mn})$$

образуют базис в пространстве матриц 4×4 , мы получили исчерпывающий набор всевозможных билинейных дираковских выражений и их характеристики относительно преобразований группы Лоренца, включая дискретную операцию инверсии пространства.

Операция зарядового сопряжения сохраняет спиральность, т.е. переводит правый спинор в правый и аналогично действует на левый спинор, а также меняет знак комплексной фазы поля, которая связана со знаком заряда, так что, опуская фазу преобразования,

$$\begin{aligned}\bar{\chi}^{\dot{\alpha}} &\xrightarrow{\mathbb{C}} \bar{\theta}^{\dot{\alpha}} = (\epsilon^{\alpha\beta} \theta_{\beta})^{\dagger} = ((i\sigma_2 \theta)^T)^{\dagger} = i\sigma_2 \theta^*, \\ \theta_{\alpha} &\xrightarrow{\mathbb{C}} \chi_{\alpha} = (\epsilon_{\dot{\alpha}\dot{\beta}} \bar{\chi}^{\dot{\beta}})^{\dagger} = ((-i\sigma_2 \bar{\chi})^T)^{\dagger} = -i\sigma_2 \bar{\chi}^*.\end{aligned}$$

Значит,

$$\mathbb{C}\psi = \begin{pmatrix} 0 & i\sigma_2 \\ -i\sigma_2 & 0 \end{pmatrix} \psi^* = -i\gamma_2 \psi^*.\tag{5.42}$$

Действие спинора, инвариантное относительно каждого из дискретных преобразований группы Лоренца по отдельности, принимает вид

$$S_D = \int d^4x \psi \not{p} \psi.\tag{5.43}$$

Таким образом, безмассовое поле Дирака по сути представляет собой систему из двух вейлевских спиноров, переходящих друг в друга при инверсии пространства и сопряжении заряда.

5.2.2. Массивное поле

Дираковское поле с массой можно построить посредством действия буста на состояния базисных полей с нулевым импульсом

$$k^n = (mc, \mathbf{0}),$$

и с заданными проекциями спина на ось z

$$s_3 u_{\pm}(\mathbf{0}) = \pm \frac{1}{2} u_{\pm}(\mathbf{0}).$$

Важно, что пространственная инверсия, обращающая импульс и сохраняющая энергию и спин,

$$\mathbf{p} \xleftrightarrow{\mathbb{P}} -\mathbf{p}, \quad p_0 \xleftrightarrow{\mathbb{P}} p_0, \quad \mathbf{s} \xleftrightarrow{\mathbb{P}} \mathbf{s},$$

в случае нулевого импульса может быть дополнительно включена в полный набор наблюдаемых, так как она коммутирует с энергией и спином, поскольку инверсия сводится к матричному умножению

$$\mathbb{P}u_{\pm}(\mathbf{0}) = \gamma_0 u_{\pm}(\mathbf{0}).$$

Значит, *пространственная четность — квантовое число для массивного поля с нулевым импульсом*. Собственные значения матрицы $\gamma_0 = \boldsymbol{\tau}_1 \otimes 1$ известны: $\lambda = \pm 1$. Поэтому вводят два типа дираковских спиноров с заданными проекциями спина и пространственной четности:

$$\begin{aligned}\gamma_0 u(\mathbf{0}) &= +u_{\pm}(\mathbf{0}), \\ \gamma_0 v(\mathbf{0}) &= -v_{\pm}(\mathbf{0}).\end{aligned}\tag{5.44}$$

Преобразования Лоренца для дираковского спинора задаются трансформационными свойствами столбца $(\frac{1}{2}, 0) \oplus (0, \frac{1}{2})$, так что для буста вдоль единичного вектора \mathbf{n} имеем для правых спиноров

$$\Lambda_+(\vartheta) = \exp \left\{ \frac{1}{2} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} \vartheta \right\} = \cosh \frac{\vartheta}{2} + \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} \sinh \frac{\vartheta}{2},$$

а для левых спиноров

$$\Lambda_-(\vartheta) = \exp \left\{ -\frac{1}{2} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} \vartheta \right\} = \cosh \frac{\vartheta}{2} - \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} \sinh \frac{\vartheta}{2},$$

причем

$$\cosh \vartheta = \frac{p_0}{mc}, \quad \sinh \vartheta = \frac{|\mathbf{p}|}{mc},$$

где $p^n = (p_0, \mathbf{p})$ — 4-импульс дираковского спинора в результате действия буста, так что $\mathbf{p} = \mathbf{n} mc \sinh \vartheta$. Элементарные преобразования, согласно

$$\cosh \frac{\vartheta}{2} = \sqrt{\frac{\cosh \vartheta + 1}{2}} = \sqrt{\frac{p_0 + mc}{2mc}}, \quad \sinh \frac{\vartheta}{2} = \sqrt{\frac{\cosh \vartheta - 1}{2}} = \sqrt{\frac{p_0 - mc}{2mc}},$$

приводят к

$$\begin{aligned}\Lambda_+(\vartheta) &= \frac{1}{\sqrt{2mc(p_0 + mc)}} (p_0 + mc + \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}), \\ \Lambda_-(\vartheta) &= \frac{1}{\sqrt{2mc(p_0 + mc)}} (p_0 + mc - \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}),\end{aligned}\tag{5.45}$$

так что

$$\Lambda(\vartheta) = \begin{pmatrix} \Lambda_+ & 0 \\ 0 & \Lambda_- \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2mc(p_0 + mc)}} (p_0 + mc + \gamma_5 \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}).\tag{5.46}$$

Тогда для покоящихся спиноров действие буста сводится к

$$\Lambda(\vartheta) u(\mathbf{0}) = \frac{1}{\sqrt{2mc(p_0 + mc)}} (\not{p} + mc) u(\mathbf{0}),$$

так как

$$\not{p} = p_0 \gamma_0 - \boldsymbol{\gamma} \cdot \mathbf{p} = p_0 \gamma_0 + \gamma_5 \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \gamma_0.$$

Аналогично,

$$\Lambda(\vartheta) v(\mathbf{0}) = \frac{1}{\sqrt{2mc(p_0 + mc)}} (-\not{p} + mc) v(\mathbf{0}).$$

Ввиду того, что

$$(\not{p} - mc)(\not{p} + mc) = p_n p_l \gamma^n \gamma^l - (mc)^2 = p_n p_l \frac{1}{2} \{\gamma^n, \gamma^l\} - (mc)^2 = p^2 - (mc)^2 = 0,$$

базисные спиноры с заданным 4-импульсом

$$u(\mathbf{p}) = \Lambda(\vartheta) u(\mathbf{0}), \quad v(\mathbf{p}) = \Lambda(\vartheta) v(\mathbf{0}),$$

удовлетворяют уравнениям

$$(\not{p} - mc) u(\mathbf{p}) = 0, \quad (\not{p} + mc) v(\mathbf{p}) = 0. \quad (5.47)$$

Их суперпозиция – поле Дирака –

$$\psi(x) = \int \frac{d^3 \mathbf{p}}{2p_0(2\pi\hbar)^3} \left\{ e^{-\frac{i}{\hbar} p \cdot x} u_{\pm}(\mathbf{p}) \mathbf{w}_{\pm}(\mathbf{p}) + e^{\frac{i}{\hbar} p \cdot x} v_{\pm}(\mathbf{p}) \bar{\mathbf{b}}_{\pm}(\mathbf{p}) \right\} \quad (5.48)$$

удовлетворяет уравнению Дирака

$$(\hat{p}_n \gamma^n - mc) \psi(x) = 0, \quad (5.49)$$

где $\hat{p}_n = i\hbar\partial_n$ — оператор 4-импульса в координатном представлении, а \mathbf{w} , \mathbf{b} — комплексные параметры в алгебре Грассмана.

Уравнение Дирака получается вследствие принципа наименьшего действия, имеющего вид

$$S_D = \int d^4 x \bar{\psi}(x) (\not{p} - mc) \psi(x). \quad (5.50)$$

Обычно принимают релятивистски инвариантную нормировку спиноров массивного поля

$$\bar{u}_{\pm}(\mathbf{0}) u_{\pm}(\mathbf{0}) = \bar{u}_{\pm}(\mathbf{p}) u_{\pm}(\mathbf{p}) = 2mc, \quad \bar{v}_{\pm}(\mathbf{0}) v_{\pm}(\mathbf{0}) = \bar{v}_{\pm}(\mathbf{p}) v_{\pm}(\mathbf{p}) = -2mc, \quad (5.51)$$

так как в явном виде в киральном представлении

$$u_+(\mathbf{0}) = \sqrt{mc} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad u_-(\mathbf{0}) = \sqrt{mc} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix},$$

и

$$v_+(\mathbf{0}) = \sqrt{mc} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad v_-(\mathbf{0}) = \sqrt{mc} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}.$$

Для спиноров с ненулевым импульсом после учета соотношения

$$\gamma_0 \Lambda(\vartheta) = \gamma_0 \left(\cosh \frac{\vartheta}{2} + \gamma_5 (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}) \sinh \frac{\vartheta}{2} \right) = \Lambda(-\vartheta) \gamma_0$$

получаем

$$\gamma_0 u_{\pm}(\mathbf{p}) = u_{\pm}(-\mathbf{p}), \quad \gamma_0 v_{\pm}(\mathbf{p}) = -v_{\pm}(-\mathbf{p}),$$

как это и должно быть для операции пространственной инверсии, которая меняет знак импульса и сохраняет спин.

После простейших выкладок легко найти гамильтониан поля

$$H_D = \int d^3\mathbf{x} \bar{\psi}(x) (\mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\gamma} + mc) \psi(x) = \int \frac{d^3\mathbf{p}}{2p_0(2\pi\hbar)^3} c p_0 \{ \bar{\mathbf{w}}_{\pm}(\mathbf{p}) \mathbf{w}_{\pm}(\mathbf{p}) - \bar{\mathbf{b}}_{\pm}(\mathbf{p}) \mathbf{b}_{\pm}(\mathbf{p}) \}. \quad (5.52)$$

Ток определяется стандартным образом вариацией действия по комплексной фазе поля $\psi_u = \exp\{-ie u/\hbar c\} \psi$,

$$\frac{1}{c} j^n = \frac{\delta S_D}{\delta \partial_n \psi} \frac{\partial \psi_u}{\partial u} = \frac{e}{c} \bar{\psi} \gamma^n \psi, \quad (5.53)$$

а заряд задается выражением

$$Q = \int d^3\mathbf{x} j^0(x) = e \int \frac{d^3\mathbf{p}}{2p_0(2\pi\hbar)^3} \{ \bar{\mathbf{w}}_{\pm}(\mathbf{p}) \mathbf{w}_{\pm}(\mathbf{p}) + \bar{\mathbf{b}}_{\pm}(\mathbf{p}) \mathbf{b}_{\pm}(\mathbf{p}) \}. \quad (5.54)$$

После этого процедура квантования согласованным образом приводит, конечно, к оператору поля

$$\hat{\psi}(x) = \int \frac{d^3\mathbf{p}}{2p_0(2\pi\hbar)^3} \left\{ e^{-\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot \mathbf{x}} u_{\pm}(\mathbf{p}) \mathbf{a}_{\pm}(\mathbf{p}) + e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot \mathbf{x}} v_{\pm}(\mathbf{p}) \mathbf{a}_{c,\pm}^{\dagger}(\mathbf{p}) \right\}, \quad (5.55)$$

где $\mathbf{a}_{c,\pm}^{\dagger}(\mathbf{p})$ — оператор рождения античастиц с импульсом \mathbf{p} , зарядом $-e$ и проекцией спина на ось z , равной $\pm \frac{1}{2}$, а $\mathbf{a}_{\pm}(\mathbf{p})$ — оператор уничтожения частиц с импульсом \mathbf{p} , зарядом $+e$ и проекцией спина на ось z , равной $\pm \frac{1}{2}$. Когерентные состояния, определенные по этим операторам уничтожения, соответствуют классическим полям, которые получаются усреднением по таким когерентным состояниям. Безусловно, произвольное классическое поле можно представить как суперпозицию усредненных когерентных состояний, что приводит к непассоновскому распределению по числу квантов и их флуктуациям.

5.2.3. Собственные состояния спина

В приложениях приходится оперировать спинорами, вектор поляризации которых направлен не вдоль заданной оси (мы использовали ось z), а вдоль произвольного 4-вектора, что позволяет проводить расчеты в явно ковариантном виде. Построим проекторы на состояния с заданным значением вектора поляризации, т.е. состояния, спин которых имеет проекцию $+\frac{1}{2}$ на заданный вектор, свойства которого мы определим в ходе его построения в явном виде.

Пусть в системе покоя массивного спинорного поля Дирака спин направлен вдоль единичного вектора $\boldsymbol{\epsilon}$, т.е. имеет место уравнение на собственное значение оператора спина

$$\boldsymbol{\epsilon} \cdot \boldsymbol{\sigma} u(\mathbf{0}) = \lambda u_{\lambda}(\mathbf{0}), \quad \lambda = \pm 1, \quad \boldsymbol{\epsilon}^2 = 1, \quad (5.56)$$

причем произведение 4-векторов поляризации $\epsilon^n = (0, \boldsymbol{\epsilon})$ и импульса $p^n = (mc, \mathbf{0})$ равно нулю

$$\epsilon_n p^n = 0.$$

С учетом определения гамма-матриц Дирака $\boldsymbol{\gamma} = \gamma_0 \gamma_5 \boldsymbol{\sigma}$ и того, что спинор в системе покоя является собственным для матрицы γ_0 , находим равенство

$$\boldsymbol{\epsilon} \cdot \boldsymbol{\sigma} u(\mathbf{0}) = \boldsymbol{\epsilon} \cdot \boldsymbol{\gamma} \gamma_5 \gamma_0 u(\mathbf{0}) = \boldsymbol{\epsilon} \cdot \boldsymbol{\gamma} \gamma_5 u(\mathbf{0}) = -\not{\epsilon} \gamma_5 u(\mathbf{0}) = \gamma_5 \not{\epsilon} u(\mathbf{0}).$$

Произведем операцию буста, так что

$$\Lambda \gamma_5 \not{\epsilon} u(\mathbf{0}) = \Lambda \gamma_5 \not{\epsilon} \Lambda^{-1} u(\mathbf{p}),$$

где, как мы выяснили (5.46),

$$\Lambda = \frac{1}{\sqrt{2mc(p_0 + mc)}} (p_0 + mc + \gamma_5 \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}),$$

и

$$\Lambda^{-1} = \gamma_0 \Lambda^\dagger \gamma_0 = \frac{1}{\sqrt{2mc(p_0 + mc)}} (p_0 + mc - \gamma_5 \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}),$$

откуда

$$\begin{aligned} \Lambda \gamma_5 \not{\epsilon} \Lambda^{-1} &= \frac{1}{2mc(p_0 + mc)} \{ (p_0 + mc)^2 \gamma_0 (\boldsymbol{\epsilon} \cdot \boldsymbol{\sigma}) + \gamma_0 (\mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\sigma}) (\boldsymbol{\epsilon} \cdot \boldsymbol{\sigma}) (\mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\sigma}) \\ &\quad + (p_0 + mc) \gamma_5 \gamma_0 ((\mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\sigma}) (\boldsymbol{\epsilon} \cdot \boldsymbol{\sigma}) + (\boldsymbol{\epsilon} \cdot \boldsymbol{\sigma}) (\mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\sigma})) \}. \end{aligned}$$

Это выражение существенно упрощается, если провести преобразования согласно алгебре сигма-матриц

$$\begin{aligned} (\mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\sigma}) (\boldsymbol{\epsilon} \cdot \boldsymbol{\sigma}) (\mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\sigma}) &= \{ (\mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\epsilon}) + i(\mathbf{p} \times \boldsymbol{\epsilon}) \cdot \boldsymbol{\sigma} \} (\mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\sigma}) = \\ (\mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\epsilon}) (\mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\sigma}) - ((\mathbf{p} \times \boldsymbol{\epsilon}) \times \mathbf{p}) \cdot \boldsymbol{\sigma} &= 2(\mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\epsilon}) (\mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\sigma}) - \mathbf{p}^2 (\boldsymbol{\epsilon} \cdot \boldsymbol{\sigma}), \end{aligned}$$

и

$$(\mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\sigma}) (\boldsymbol{\epsilon} \cdot \boldsymbol{\sigma}) + (\boldsymbol{\epsilon} \cdot \boldsymbol{\sigma}) (\mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\sigma}) = 2(\mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\epsilon}).$$

Используя связь энергии с импульсом $p_0^2 = \mathbf{p}^2 + (mc)^2$, находим

$$\Lambda \gamma_5 \not{\epsilon} \Lambda^{-1} = \gamma_0 \boldsymbol{\sigma} \cdot \left(\boldsymbol{\epsilon} + \left\{ \frac{p_0}{mc} - 1 \right\} \mathbf{n} (\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\epsilon}) \right) + \gamma_5 \gamma_0 (\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\epsilon}) \frac{|\mathbf{p}|}{mc},$$

где $\mathbf{n} = \mathbf{p}/|\mathbf{p}|$ — единичный вектор в направлении буста. Теперь заметим, что преобразование Лоренца, переводящее 4-импульс покоящейся частицы в 4-импульс движущейся,

$$p_0 = mc \cosh \vartheta, \quad \mathbf{p} = \mathbf{n} mc \sinh \vartheta,$$

для вектора поляризации $\boldsymbol{\epsilon}^n = (0, \boldsymbol{\epsilon})$ имеет вид

$$\tilde{\boldsymbol{\epsilon}}_0 = (\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\epsilon}) \sinh \vartheta, \quad \tilde{\boldsymbol{\epsilon}} = \boldsymbol{\epsilon} + \{ \cosh \vartheta - 1 \} \mathbf{n} (\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\epsilon}),$$

причем

$$\sinh \vartheta = \frac{|\mathbf{p}|}{mc}, \quad \cosh \vartheta = \frac{p_0}{mc}.$$

Кроме того,

$$\gamma_5 \not{\tilde{\epsilon}} = \gamma_5 \gamma_0 \tilde{\boldsymbol{\epsilon}}_0 + \gamma_0 (\boldsymbol{\sigma} \cdot \tilde{\boldsymbol{\epsilon}}),$$

так что в итоге получаем

$$\Lambda \gamma_5 \not{\epsilon} \Lambda^{-1} = \gamma_5 \not{\epsilon},$$

т.е. буст просто преобразует 4-вектор поляризации в систему движущейся частицы. Поэтому уравнение на собственные значения проекции спина на вектор поляризации в произвольной системе отсчета принимают ковариантный вид

$$\gamma_5 \not{\epsilon} u_\lambda(\mathbf{p}) = \lambda u_\lambda(\mathbf{p}), \quad \lambda = \pm 1, \quad \epsilon^2 = -1, \quad \epsilon \cdot p = 0, \quad (5.57)$$

где мы опустили знак тильды, указывающий на то, что вектор поляризации спинора записывается в системе отсчета движущейся частицы.

Совершенно аналогично для спиноров античастиц получим

$$\gamma_5 \not{\epsilon} v_\lambda(\mathbf{p}) = -\lambda v_\lambda(\mathbf{p}), \quad \lambda = \pm 1, \quad \epsilon^2 = -1, \quad \epsilon \cdot p = 0. \quad (5.58)$$

Значит, проекторы на состояния с заданной проекцией спина частицы на вектор поляризации имеют вид

$$P_\pm = \frac{1}{2}(1 \pm \gamma_5 \not{\epsilon}), \quad (5.59)$$

а для античастиц —

$$P_\pm^c = \frac{1}{2}(1 \mp \gamma_5 \not{\epsilon}). \quad (5.60)$$

5.2.4. Сумма по поляризациям

Для покоящихся спиноров сумму по поляризациям — матрицу

$$\Pi(\mathbf{0}) = \sum_\lambda u_\lambda(\mathbf{0}) \bar{u}_\lambda(\mathbf{0})$$

можно вычислить в явном виде как прямое произведение строк и столбцов

$$\Pi(\mathbf{0}) = mc(1, 0, 1, 0) \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} + mc(0, 1, 0, 1) \otimes \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} = mc \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

или в ковариантном виде

$$\Pi(\mathbf{0}) = mc(\gamma_0 + 1) = (\not{p}' + mc), \quad p' = (mc, \mathbf{0}).$$

Поскольку преобразование Лоренца для матрицы A сводятся к преобразованию 4-вектора A^n в движущуюся систему отсчета (проделайте это упражнение самостоятельно):

$$\Lambda A' \Lambda^{-1} \rightarrow A,$$

сумма по поляризациям для движущихся частиц —

$$\Pi(\mathbf{p}) = (\not{p} + mc), \quad (5.61)$$

и аналогично для античастиц

$$\Pi^c(\mathbf{p}) = \sum_\lambda v_\lambda(\mathbf{p}) \bar{v}_\lambda(\mathbf{p}) = (\not{p} - mc). \quad (5.62)$$

5.2.5. Представление Дирака

В оригинальной работе Дирака, посвященной выводу уравнения для релятивистского электрона, он использовал не киральное представление для гамма-матриц, введенное выше, а нашел другой вид гамма-матриц, удовлетворяющих определяющему их соотношению антикоммутации (5.36). Представление Дирака для гамма-матриц, естественно, эквивалентно киральному, так как оно может быть получено унитарным преобразованием с

$$\mathfrak{U} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\gamma_0 + \gamma_5), \quad \mathfrak{U}^\dagger = \mathfrak{U}, \quad \mathfrak{U}^2 = 1, \quad (5.63)$$

так что

$$\gamma_D^n = \mathfrak{U} \gamma^n \mathfrak{U}^\dagger.$$

Тогда легко найти, что

$$\gamma_0 \xrightarrow{\mathfrak{U}} \gamma_5, \quad \gamma_5 \xrightarrow{\mathfrak{U}} \gamma_0, \quad \boldsymbol{\gamma} \xrightarrow{\mathfrak{U}} -\boldsymbol{\gamma},$$

т.е. матрицы γ_0 и γ_5 меняются местами, а $\boldsymbol{\gamma}$ меняет знак, и в представлении Дирака (опускаем индекс D , указывающий на представление)

$$\gamma_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad \gamma_5 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\gamma} = \begin{pmatrix} 0 & \boldsymbol{\sigma} \\ -\boldsymbol{\sigma} & 0 \end{pmatrix}. \quad (5.64)$$

5.2.6. Дискретные симметрии

В отличие от случая скалярного поля комплексные фазы преобразования операторов рождения и уничтожения при наличии ненулевого спина могут, вообще говоря, зависеть от проекции спина. Для того чтобы определить вид этой зависимости, воспользуемся соотношением для базисных состояний оператора спина у массивной частицы, а именно,

$$s_+ |s, m_s\rangle = \sqrt{s(s+1) - m_s(m_s+1)} |s, m_s+1\rangle, \quad s_\pm = s_x \pm i s_y. \quad (5.65)$$

Тогда, действуя на это равенство линейным оператором пространственной инверсии, сохраняющим спин, находим, что, если

$$\mathbb{P} |s, m_s\rangle = \xi_{m_s} |s, m_s\rangle, \quad |\xi_{m_s}| = 1,$$

то

$$\xi_{m_s} = \xi_{m_s+1},$$

т.е. фаза для действия оператора пространственной инверсии не зависит от проекции спина. Значит, пространственная инверсия действует на спинорные операторы рождения и уничтожения как

$$\mathbb{P} \mathfrak{a}_\pm^\dagger(\mathbf{p}) \mathbb{P}^{-1} = \xi \mathfrak{a}_\pm^\dagger(-\mathbf{p}), \quad \mathbb{P} \mathfrak{a}_{c,\pm}^\dagger(\mathbf{p}) \mathbb{P}^{-1} = \xi_c \mathfrak{a}_{c,\pm}^\dagger(-\mathbf{p}), \quad (5.66)$$

а поле преобразуется как

$$\mathbb{P} \hat{\psi}(t, \mathbf{x}) \mathbb{P}^{-1} = \xi^* \gamma_0 \hat{\psi}(t, -\mathbf{x}), \quad (5.67)$$

если $\xi_c = \xi^*$.

Поскольку зарядовое сопряжение сохраняет спин, заключаем, что фаза этого линейного преобразования также не зависит от значения проекции спина. Поэтому

$$\mathbb{C} \mathbf{a}_{\pm}^{\dagger}(\mathbf{p}) \mathbb{C}^{-1} = \eta \mathbf{a}_{c,\pm}^{\dagger}(\mathbf{p}), \quad \mathbb{C} \mathbf{a}_{c,\pm}^{\dagger}(\mathbf{p}) \mathbb{C}^{-1} = \eta^* \mathbf{a}_{\pm}^{\dagger}(\mathbf{p}), \quad (5.68)$$

и

$$\mathbb{C} \hat{\psi}(t, \mathbf{x}) \mathbb{C}^{-1} = -\eta^* i\gamma_2 \hat{\psi}^*(t, \mathbf{x}), \quad (5.69)$$

где комплексное сопряжение действует как эрмитово сопряжение на операторы рождения и уничтожения.

Аналогично, для фазы антилинейной операции инверсии стрелы времени, которая меняет знак спина, из (5.65) в силу

$$\mathbb{T} \mathbf{s} \mathbb{T}^{-1} = -\mathbf{s}, \quad \mathbb{T} i \mathbb{T}^{-1} = -i, \quad \mathbb{T} |s, m_s\rangle = \zeta_{m_s} |s, -m_s\rangle, \quad |\zeta_{m_s}| = 1,$$

получаем условие

$$-\zeta_{m_s} = \zeta_{m_s+1}, \quad (5.70)$$

которое удовлетворяется, если положить

$$\zeta_{m_s} = \zeta (-1)^{s-m_s}, \quad (5.71)$$

где ζ — значение фазы инверсии времени при $m_s = s$. Значит,

$$\mathbb{T} \mathbf{a}_{\pm}^{\dagger}(\mathbf{p}) \mathbb{T}^{-1} = \zeta_{\pm} \mathbf{a}_{\mp}^{\dagger}(-\mathbf{p}), \quad \mathbb{T} \mathbf{a}_{c,\pm}^{\dagger}(\mathbf{p}) \mathbb{T}^{-1} = \zeta_{c,\pm} \mathbf{a}_{c,\mp}^{\dagger}(-\mathbf{p}), \quad (5.72)$$

а поле преобразуется согласно

$$\mathbb{T} \hat{\psi}(t, \mathbf{x}) \mathbb{T}^{-1} = \zeta^* i\sigma_2 \hat{\psi}^*(-t, \mathbf{x}), \quad (5.73)$$

причем $\zeta^* = \zeta_c$. В самом деле, при нулевом импульсе легко найти, что

$$i\sigma_2 u_{\pm}^*(\mathbf{0}) = \pm u_{\mp}(\mathbf{0}) \Rightarrow i\sigma_2 u_{m_s}^*(\mathbf{0}) = (-1)^{s-m_s} u_{-m_s}(\mathbf{0}),$$

$$i\sigma_2 v_{\pm}^*(\mathbf{0}) = \pm v_{\mp}(\mathbf{0}) \Rightarrow i\sigma_2 v_{m_s}^*(\mathbf{0}) = (-1)^{s-m_s} v_{-m_s}(\mathbf{0}),$$

и в силу свойства преобразования Лоренца $\Lambda(\mathbf{p})$

$$\sigma_2 \Lambda^*(\mathbf{p}) = \Lambda(-\mathbf{p}) \sigma_2,$$

находим

$$i\sigma_2 u_{m_s}^*(\mathbf{p}) = (-1)^{s-m_s} u_{-m_s}(-\mathbf{p}), \quad i\sigma_2 v_{m_s}^*(\mathbf{p}) = (-1)^{s-m_s} v_{-m_s}(-\mathbf{p}).$$

Поэтому действие антилинейного оператора инверсии времени дает

$$\mathbb{T} \hat{\psi}(t, \mathbf{x}) \mathbb{T}^{-1} = \zeta \int \frac{d^3 \mathbf{p}}{2p_0 (2\pi\hbar)^3} \left\{ e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot \mathbf{x}} i\sigma_2 u_{m_s}(\mathbf{p}) (-1)^{s-m_s} \mathbf{a}_{-m_s}(-\mathbf{p}) + e^{-\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot \mathbf{x}} i\sigma_2 v_{m_s}(\mathbf{p}) (-1)^{s-m_s} \mathbf{a}_{c,-m_s}^{\dagger}(-\mathbf{p}) \right\},$$

так что после использования

$$[(-1)^{s-m_s}]^2 = 1,$$

и замены переменной интегрирования $\mathbf{p} \mapsto -\mathbf{p}$ получаем равенство (5.73), где операция комплексного сопряжения относится лишь к числовым факторам, а операторы рождения и уничтожения преобразуются согласно действию инверсии времени.

5.3. Майорановские спиноры

Идея абсолютно нейтрального спинора была реализована итальянским физиком Майорана. Поскольку нейтральное поле должно переходить в самого себя при зарядовом сопряжении, и оно, следовательно, с необходимостью является собственным для оператора зарядового сопряжения, в майорановское поле должны входить как правые, так и левые спиноры, а значит, относительно действия группы $SL(2, \mathbb{C})$ оно должно преобразовываться также, как и дираковский биспинор

$$(\tfrac{1}{2}, 0) \oplus (0, \tfrac{1}{2}) = \begin{pmatrix} \bar{\chi}^{\dot{\alpha}} \\ \theta_{\alpha} \end{pmatrix} = \psi_M. \quad (5.74)$$

Операция зарядового сопряжения в киральном представлении, как мы выяснили, имеет вид

$$\mathbb{C} \psi_M = -i\gamma_2 \psi_M = \begin{pmatrix} i\sigma_2 \theta^* \\ -i\sigma_2 \bar{\chi}^* \end{pmatrix}.$$

Тогда уравнение на собственные значения для оператора зарядового сопряжения

$$\mathbb{C} \psi_M = \pm \psi_M$$

имеет решения

$$\theta = \pm \chi = \mp i\sigma_2 \bar{\chi}^*.$$

Значит майорановские спиноры с положительной и отрицательной зарядовой четностью имеют вид

$$\psi_M = \begin{pmatrix} \bar{\chi} \\ \pm \chi \end{pmatrix}, \quad (5.75)$$

т.е. они построены из вейлевского спинора и сопряженного к нему вейлевского спинора.

Вектор электрического тока

$$j_M^n = \bar{\psi}_M \gamma^n \psi_M = \chi \sigma^n \bar{\chi} + \bar{\chi} \bar{\sigma}^n \chi$$

тождественно обращается в нуль

$$j_M^n \equiv 0,$$

если принять во внимание перестановочные соотношения для грассмановых величин:

$$\chi \sigma^n \bar{\chi} = \sigma_{\alpha\dot{\alpha}}^n \epsilon^{\alpha\beta} \chi_{\beta} \epsilon^{\dot{\alpha}\dot{\beta}} \bar{\chi}_{\dot{\beta}} = (\bar{\sigma}^n)^{\dot{\beta}\beta} \chi_{\beta} \bar{\chi}_{\dot{\beta}} = -\bar{\chi} \bar{\sigma}^n \chi,$$

где $(\bar{\sigma}^n)^{\dot{\beta}\beta} = \sigma_{\alpha\dot{\alpha}}^n \epsilon^{\alpha\beta} \epsilon^{\dot{\alpha}\dot{\beta}} = (-i\sigma_2 \sigma^n i\sigma_2)^T$.

Действие для массивного майорановского спинора можно легко получить из действия дираковского спинора, расписанного в киральном представлении

$$S_D = \int d^4x \bar{\psi}_D (\not{p} - mc) \psi_D = \int d^4x \{ \chi p_k \sigma^k \bar{\chi} + \bar{\theta} p_k \bar{\sigma}^k \theta - mc (\chi \theta + \bar{\theta} \bar{\chi}) \}, \quad (5.76)$$

если учесть условие зарядовой самосопряженности, так что

$$S_M = \int d^4x \bar{\psi}_M (\not{p} - mc) \psi_M = \int d^4x \{ \chi p_k \sigma^k \bar{\chi} + \bar{\chi} p_k \bar{\sigma}^k \chi \mp mc (\chi \chi + \bar{\chi} \bar{\chi}) \}, \quad (5.77)$$

где последний вклад носит имя *майорановского* массового члена. Как видим, майорановская масса вводится для абсолютно нейтральных спиноров, так как ее вклад нарушает инвариантность относительно преобразований комплексной фазы поля: действительно, вещественная величина

$$\chi\chi + \bar{\chi}\bar{\chi} = \bar{\chi}^\dagger i\sigma_2 \bar{\chi}^* + \bar{\chi}^T i\sigma_2 \bar{\chi} = 2\Re[\bar{\chi}^\dagger i\sigma_2 \bar{\chi}^*]$$

изменяется при введении дополнительной фазы у спинора $\bar{\chi}$.

В научной литературе рассматриваются модели с правым нейтрино, которое не участвует в сильных, слабых и электромагнитных взаимодействиях, т.е. не несет никакого из известных зарядов. Поэтому такое правое, как говорят, “стерильное” нейтрино можно считать майорановской частицей.

Лекция № 6

Векторное поле и уравнения Максвелла, циркулярная поляризация, продольное поле, преобразования Лоренца и калибровочная инвариантность, действие для поперечных мод, квантованное поле, массивное векторное поле, уравнение Прока, калибровочное преобразование базиса гильбертова пространства в нерелятивистской и релятивистской квантовой механике, операция трансляций и ковариантная производная, калибровочное поле, тензор напряженности как коммутатор ковариантных производных, минимальное взаимодействие заряженных релятивистских частиц с калибровочным полем, спектр атом водорода из релятивистского уравнения для скалярной частицы, сведение к нерелятивистскому уравнению, расщепление уровней по орбитальному моменту, спектр уровней из уравнения Дирака, квантовые числа состояний, важность P -четности, расщепление уровней по полному моменту.

6.1. Безмассовое векторное поле

Спиновый оператор векторного поля \mathcal{A}^μ , матрица

$$(s^\alpha)^\mu_\nu = -i\epsilon_{\alpha\mu\nu}$$

не имеет временных компонент, т.е. не приводит к смешиванию 3-мерного поля \mathcal{A}^μ с \mathcal{A}_0 . Поэтому общие операторные уравнения

$$\frac{1}{\hbar} W^n = \mathbf{s} p^n,$$

где

$$\frac{1}{\hbar} W_0 = \mathbf{p} \cdot \mathbf{s}, \quad \frac{1}{\hbar} \mathbf{W} = p_0 \mathbf{s} - \text{sign}(\mathbf{s}) i (\mathbf{p} \times \mathbf{s}),$$

в случае безмассового векторного поля, во-первых, не содержат компоненты \mathcal{A}_0 , которая тем самым не имеет отношения к динамике свободного векторного поля, а во-вторых, в силу $\mathbf{s} = \lambda = \pm 1$ принимают простой вид

$$p_0 \mathcal{A}^\mu = \lambda (\mathbf{p} \cdot \mathbf{s})^\mu_\nu \mathcal{A}^\nu, \quad \lambda p^\alpha \mathcal{A}^\mu = p_0 (s^\alpha)^\mu_\nu \mathcal{A}^\nu - \lambda i \epsilon_{\alpha\beta\gamma} p^\beta (s^\gamma)^\mu_\nu \mathcal{A}^\nu.$$

Подставляя операторы 4-импульса $(p_0, \mathbf{p}) = i\hbar(\partial_0, -\nabla)$ и выражение для оператора спина, находим из первого уравнения

$$i\partial_0 \mathcal{A} = \lambda \text{rot} \mathcal{A}. \quad (6.1)$$

Второе уравнение

$$-i\lambda\partial_\alpha\mathcal{A}^\mu = \epsilon_{\alpha\mu\nu}\partial_0\mathcal{A}^\nu + i\lambda(\delta_\alpha^\mu\partial_\nu\mathcal{A}^\nu - \partial_\mu\mathcal{A}^\alpha)$$

содержит симметричную и антисимметричную части тензора, которые соответственно дают

$$\partial_\nu\mathcal{A}^\nu = \operatorname{div}\mathcal{A} = 0, \quad -i\lambda\operatorname{rot}\mathcal{A} = \partial_0\mathcal{A}.$$

Последнее соотношение повторяет полученное выше (6.1), так что, суммируя все связи для безмассового векторного поля, получаем систему

$$-\frac{1}{c}\frac{\partial\mathcal{A}}{\partial t} = i\lambda\operatorname{rot}\mathcal{A}, \quad \operatorname{div}\mathcal{A} = 0, \quad \mathcal{A}_0 \equiv 0, \quad (6.2)$$

где первое уравнение динамическое, так как оно содержит производную по времени, а два последних — условия, исключающие компоненты 4-векторного поля, не имеющие отношения к безмассовому векторному полю.

Из (6.2), конечно, следует уравнение массовой поверхности

$$\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2\mathcal{A}}{\partial t^2} = -\operatorname{rot}\operatorname{rot}\mathcal{A} \Rightarrow \square\mathcal{A} = 0.$$

Основные уравнения (6.2) имеют нековариантный вид: два последних из них, очевидно, не могут выполняться в произвольной системе отсчета. Однако, можно, во-первых, записать их ковариантно, если перейти в импульсное представление, так что

$$\operatorname{div}\mathcal{A} = 0 \quad \mapsto \quad \mathbf{k} \cdot \mathcal{A}(\mathbf{k}) = 0,$$

т.е. поле является поперечным. Уравнение массовой поверхности примет вид

$$(k_0^2 - \mathbf{k}^2)\mathcal{A}(\mathbf{k}) = k^2\mathcal{A}(\mathbf{k}) = 0.$$

Поэтому с учетом

$$\mathcal{A}_0 \equiv 0$$

находим ковариантную форму поперечности

$$k_n\mathcal{A}^n = 0 \quad \Leftrightarrow \quad \partial_n\mathcal{A}^n = 0, \quad (6.3)$$

и это уравнение уже справедливо в произвольной системе отсчета.

Во-вторых, динамическое уравнение также можно записать ковариантно, если ввести антисимметричный тензор напряженности поля

$$F_{kn} = \partial_k\mathcal{A}_n - \partial_n\mathcal{A}_k, \quad (6.4)$$

откуда

$$F_{0\mu} = -\partial_0\mathcal{A}^\mu - \partial_\mu\mathcal{A}_0 \quad \mapsto \quad -\partial_0\mathcal{A}^\mu,$$

если учесть условие $\mathcal{A}_0 \equiv 0$. Стандартным образом определяют электрическое поле

$$\mathcal{E}^\alpha = F_{0\alpha},$$

и магнитное поле

$$\mathcal{H}^\gamma = -\frac{1}{2}\epsilon_{\alpha\beta\gamma}F_{\alpha\beta} \quad F_{\alpha\beta} = -\epsilon_{\alpha\beta\gamma}\mathcal{H}^\gamma.$$

Подставляя определение тензора напряженности поля, находим

$$\mathcal{H} = \text{rot} \mathcal{A} \quad \Rightarrow \quad \text{div} \mathcal{H} = 0.$$

Тогда динамическое уравнение примет вид

$$\mathcal{E} = i\lambda \mathcal{H}. \quad (6.5)$$

Отсюда

$$\text{div} \mathcal{E} = 0.$$

Кроме того динамическое уравнение (6.2) устанавливает операторное равенство для линейных уравнений поля

$$\text{rot} \cong i\lambda \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t}.$$

Тогда уравнение (6.5) дает

$$\text{rot} \mathcal{H} = \frac{1}{c} \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial t}, \quad \text{rot} \mathcal{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial t}.$$

В итоге, мы получили уравнения Максвелла для свободного электромагнитного векторного поля, которые могут быть записаны ковариантно

$$\partial_k F^{kn} = 0, \quad (6.6)$$

при условии

$$\partial_k \mathcal{A}^k = 0, \quad \mathcal{A}_0 \equiv 0.$$

Эти уравнения, как известно, как раз и описывают две поперечных поляризации безмассового векторного поля.

Заметим, что уравнение (6.2) является равенством между вектором и псевдовектором и содержит псевдоскалярную величину поляризации λ . Поэтому определим псевдотензор, дуальный тензору напряженностей:

$$\tilde{F}^{mn} = \frac{1}{2} \epsilon^{mnp} F_{kp}, \quad (6.7)$$

у которого компоненты имеют вид

$$\tilde{F}_{0\alpha} = \mathcal{H}^\alpha, \quad \tilde{F}_{\alpha\beta} = \epsilon_{\alpha\beta\gamma} \mathcal{E}^\gamma,$$

т.е. имеет место подстановка — преобразование дуальности:

$$\mathcal{E} \mapsto \mathcal{H}, \quad \mathcal{H} \mapsto -\mathcal{E}.$$

тогда основное уравнение безмассового поля с заданной спиральностью примет ковариантный вид

$$F_{kn} = i\lambda \tilde{F}_{kn}. \quad (6.8)$$

Решение уравнения в виде плоской волны можно представить в виде

$$\mathcal{A}(x) = e^{-i(\omega t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{x})} \epsilon_\perp,$$

так что подстановка дает

$$\frac{\omega}{c} \epsilon_{\perp} = i\lambda \mathbf{k} \times \epsilon_{\perp}, \quad \omega = c|\mathbf{k}|.$$

Если $\mathbf{k} \uparrow\uparrow z$, то ортонормированные базисные векторы, отвечающие положительной и отрицательной киральности —

$$\epsilon_{\perp}^{(+)} = \frac{1}{\sqrt{2}}(1, i, 0), \quad \epsilon_{\perp}^{(-)} = \frac{1}{\sqrt{2}}(1, -i, 0).$$

При этом, конечно, для 4-векторов поляризации $\epsilon^n = (0, \epsilon, 0)$

$$\epsilon_n^* \epsilon^n = -\epsilon^* \cdot \epsilon = -1.$$

6.1.1. Преобразования Лоренца и калибровочная инвариантность

В произвольной системе отсчета у векторного поля появляется ненулевая временная компонента, так как преобразование Лоренца имеет вид

$$\mathcal{A}'_n(x') = \Lambda_n^m \mathcal{A}^m(x).$$

В импульсном представлении это преобразование будет иметь тот же вид, но нам необходимо также принять во внимание дополнительное условие $k_n \mathcal{A}^n = k_0 \mathcal{A}_0 - \mathbf{k} \cdot \mathbf{A} = 0$, которое в силу своей ковариантности справедливо и в штрихованной системе. Значит,

$$\mathcal{A}'_0 = \frac{\mathbf{k}' \cdot \mathbf{A}'}{k'_0},$$

и вследствие $k'_0 = |\mathbf{k}'|$ поле можно представить в виде

$$\mathcal{A}'_n = k'_n \frac{\mathbf{k}' \cdot \mathbf{A}'}{(k'_0)^2} + \mathcal{A}_n^{\perp},$$

где уже

$$\mathcal{A}_0^{\perp} \equiv 0, \quad \mathbf{k}' \cdot \mathbf{A}_{\perp} = 0.$$

В итоге, динамическое поле выражается следующим образом

$$\mathcal{A}_n^{\perp}(x') = \mathcal{A}'_n(x') - \partial'_n f(x'),$$

где f — подходящая функция, удовлетворяющая условию $\square f = 0$. От этого условия можно избавиться, если помнить, что продольные компоненты поля не являются физическими. Но именно эти компоненты не входят в тензор напряженности, поэтому формулировка уравнений движения векторного безмассового поля в терминах тензора напряженности автоматически исключает нефизические продольные компоненты. Отсюда заключаем, что динамическое безмассовое векторное поле является калибровочным, и оно удовлетворяет уравнениям

$$\partial_k F^{kn} = 0, \quad \partial_k \tilde{F}^{kn} = 0, \quad (6.9)$$

причем состояния с положительной и отрицательной киральностью $\lambda = \pm 1$ удовлетворяют условию

$$F_{kn} = i\lambda \tilde{F}_{kn}. \quad (6.8)$$

6.1.2. Действие и квантование

Найденные нами поперечные моды с заданной спиральностью удовлетворяют уравнению массовой поверхности. Поскольку спиральность входит в полный набор наблюдаемых, ее коммутатор с гамильтонианом равен нулю, и следовательно, она является интегралом движения. Поэтому построение действия для каждой поляризации по сути повторяет процедуру, проведенную для скалярных полей, с той лишь разницей, что квадрат вектора поляризации равен -1 . Тогда уравнение массовой поверхности

$$p^2 \mathcal{A}_\perp^n(x) = 0, \quad \mathcal{A}_\perp^n(x) = \left(g^{nk} - \frac{p^n p^k}{p^2} \right) \mathcal{A}_k(x),$$

где оператор

$$P^{kn} = g^{nk} - \frac{p^n p^k}{p^2}, \quad P^{kn} P_n^m = P^{km},$$

называют проектором на поперечные моды. Действие, приводящее к заданным уравнениям для векторного калибровочного поля, в полной аналогии со случаем скалярного поля имеет вид

$$S_{\text{gauge}} = -\frac{1}{2c\hbar^2} \int d^4x \mathcal{A}_\perp^n(x) p^2 \mathcal{A}_{\perp,n}(x),$$

где мы ввели знак минус, отвечающий указанной нормировке 4-вектора поляризации. Подстановка поперечного проектора, выражение оператора 4-импульса через частные производные и однократное интегрирование по частям дают

$$S_{\text{gauge}} = -\frac{1}{2c} \int d^4x \partial^k \mathcal{A}^n (\partial_k \mathcal{A}_n - \partial_n \mathcal{A}_k),$$

так что с учетом антисимметрии полученного тензора находим хорошо известное выражение для действия вещественного калибровочного поля⁶

$$S_{\text{gauge}} = -\frac{1}{4c} \int d^4x F_{kn} F^{kn}. \quad (6.10)$$

Квантованное поле в полной аналогии со случаем скалярного поля имеет вид

$$\hat{\mathcal{A}}_\perp(x) = \int \frac{d^3\mathbf{k}}{2k_0(2\pi)^3} \left\{ e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \epsilon_\lambda(\mathbf{k}) \mathbf{a}_\lambda(\mathbf{k}) + e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \epsilon_\lambda^*(\mathbf{k}) \mathbf{a}_\lambda^\dagger(\mathbf{k}) \right\}, \quad (6.11)$$

где 4-векторы поляризации являются поперечными

$$\epsilon_n p^n = 0, \quad \epsilon_0 = 0.$$

Электрическое поле

$$\mathcal{E}(x) = -\partial_0 \mathcal{A}(x) = \int \frac{d^3\mathbf{k}}{2k_0(2\pi)^3} i k_0 \left\{ e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \epsilon_\lambda(\mathbf{k}) \mathbf{a}_\lambda(\mathbf{k}) - e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \epsilon_\lambda^*(\mathbf{k}) \mathbf{a}_\lambda^\dagger(\mathbf{k}) \right\}$$

дает гамильтониан свободных волн

$$: H : = \int d^3\mathbf{x} : \mathcal{E}^2(x) : = \int \frac{d^3\mathbf{k}}{2k_0(2\pi)^3} k_0 \mathbf{a}_\lambda^\dagger(\mathbf{k}) \mathbf{a}_\lambda(\mathbf{k}),$$

⁶В принятой нормировке полей электрический заряд нормирован условием $e^2/(4\pi\hbar c) \approx 1/137$, а потенциальная энергия двух зарядов имеет вид $V = e_1 e_2 / 4\pi r$.

если учесть ортонормированность векторов поляризации

$$\epsilon_\lambda \cdot \epsilon_{\lambda'}^* = \delta_{\lambda\lambda'}.$$

Релятивистская нормировка операторов рождения и уничтожения имеет стандартный вид

$$[a_\lambda(\mathbf{k}), a_{\lambda'}^\dagger(\mathbf{k}')] = 2\hbar\omega(2\pi)^3 \delta_{\lambda\lambda'} \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}').$$

На этом мы завершаем рассмотрение безмассового вещественного калибровочного векторного поля, которое мы провели в формализме канонического квантования, вследствие чего изложение велось в нековариантном виде, так как мы выделили в явном виде динамические переменные – поперечные компонентные поля. Вопросы ковариантного квантования калибровочных полей обычно относят к курсу квантовой теории поля.

В заключение приведем без вывода действие для массивного векторного поля \mathcal{V}^n

$$S = \int d^4x \left\{ -\frac{1}{4c} F_{kn}(\mathcal{V}) F^{kn}(\mathcal{V}) + \frac{1}{2} \left(\frac{mc}{\hbar} \right)^2 \mathcal{V}^n \mathcal{V}_n \right\} = -\frac{1}{2c\hbar^2} \int d^4x \mathcal{V}_\perp^n \{p^2 - (mc)^2\} \mathcal{V}_{\perp,n},$$

где условие поперечности поля $\partial_n \mathcal{V}^n = 0$ является следствием уравнений движения, полученных из вариационного принципа — уравнений Прока:

$$\partial_n F^{nk} = - \left(\frac{mc}{\hbar} \right)^2 \mathcal{V}^k,$$

поскольку $\partial_k \partial_n F^{kn} \equiv 0$, как свертка симметричного тензора с антисимметричным.

6.2. Калибровочное взаимодействие

Глобальная инвариантность действия релятивистских полей относительно преобразований комплексной фазы определяет, согласно теореме Нетер, сохраняющиеся токи и, как следствие, интегралы движения — заряды, которые мы использовали при построении квантованных полей для описания частиц и античастиц. В нерелятивистской квантовой механике волновая функция $\Psi(x) = \langle x | \Psi \rangle$ приобретает комплексную фазу, если произвести замену базисных кет-состояний

$$|x\rangle \mapsto |x_u\rangle = e^{iuY \frac{e}{\hbar c}} |x\rangle, \quad (6.12)$$

где Y — оператор, который имеет фиксированное значение для заданного типа частицы, так что

$$\Psi_u(x) = \langle x_u | \Psi \rangle = e^{-iuY \frac{e}{\hbar c}} \Psi(x). \quad (6.13)$$

Если u — глобальный параметр, т.е. он не зависит от координат и времени, то приобретаемая всеми базисными состояниями комплексная фаза не может быть наблюдаемой, так как она всегда сокращается при определении амплитуд вероятностей или матричных элементов операторов.

Если параметр преобразования u локальный, т.е. зависит от координат и времени $u = u(x)$, то состояния частицы в разных точках приобретают, вообще говоря, относительную фазу, которая уже в принципе может быть наблюдаема. Выяснение вопроса о наблюдаемости фазы — предмет этого параграфа.

Важно, чтобы переход от одного базиса состояний к другому осуществлялся унитарным преобразованием, сохраняющим нормировку состояний. Отсюда следует, что оператор U

должен быть эрмитовым. Мы остановимся на простейшем случае — группе $U(1)$, для которой $Y = Q$ — диагональный оператор, равный значению заряды частиц в единицах e , как мы это видели при квантовании свободных полей.

В релятивистской теории обобщением преобразования комплексной фазы базиса $|x\rangle$ является унитарное преобразование комплексной фазы одночастичного состояния в фокковском пространстве⁷:

$$|\mathbf{p}\rangle \mapsto |\mathbf{p}_u\rangle = e^{iuY \frac{e}{\hbar c}} |\mathbf{p}\rangle, \quad (6.14)$$

что можно свести к переопределению оператора рождения частицы $\mathbf{a}^\dagger(\mathbf{p})$,

$$\mathbf{a}_u^\dagger(\mathbf{p}) = \mathbf{a}^\dagger(\mathbf{p}) e^{iuY \frac{e}{\hbar c}} \Rightarrow \mathbf{a}_u(\mathbf{p}) = \mathbf{a}(\mathbf{p}) e^{-iuY \frac{e}{\hbar c}}. \quad (6.15)$$

Для античастиц $Y_c = -Y$, так что релятивистское квантованное поле, построенное, как мы видели, из спинорных мод и операторов рождения античастиц и операторов уничтожения частиц, подвергается тому же преобразованию (6.13), что и классическое.

Оператор заряда Y обладает простыми свойствами относительно группы Пуанкаре: Y является скаляром, т.е. он коммутирует со всеми генераторами группы Пуанкаре, так как он не изменяет квантовых чисел состояний, связанных с пространственно-временными характеристиками поля. При этом, как мы уже отмечали, его трансформационные свойства относительно дискретных операций инверсии пространства и времени задают тип взаимодействия различных киральных компонент полей. В простейшем случае группы $U(1)$ мы в дальнейшем опускаем Y для упрощения записи.

Говорят, что преобразования (6.13) образуют группу преобразований внутренней (не связанной с пространством-временем) симметрии, если действие поля остается относительно таких преобразований инвариантным. Рассмотрим калибровочные преобразования более подробно.

Оператор пространственно-временных сдвигов состояний в инфинитезимальной форме

$$T = \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \hat{p}_k dx^k, \quad \hat{p}_k = i\hbar \partial_k,$$

действует на оператор уничтожения согласно

$$\delta \mathbf{a}(\mathbf{p}) = T^\dagger \mathbf{a}(\mathbf{p}) T - \mathbf{a}(\mathbf{p}) \equiv \nabla_k \mathbf{a}(\mathbf{p}) dx^k \Rightarrow i\hbar \nabla_k \mathbf{a}(\mathbf{p}) = [\hat{p}_k, \mathbf{a}(\mathbf{p})].$$

Тогда, как мы уже показали, в силу

$$[\hat{p}_k, \mathbf{a}(\mathbf{p})] = \mathbf{a}(\mathbf{p}) p_k,$$

где $p_k = (p_0, \mathbf{p})$ — 4-импульс одночастичного состояния, находим

$$i\hbar \nabla_k \mathbf{a}(\mathbf{p}) = \mathbf{a}(\mathbf{p}) p_k,$$

т.е.

$$\nabla_k = \partial_k,$$

⁷Мы считаем здесь, что вакуум инвариантен относительно преобразований комплексной фазы: заряд вакуума равен нулю. Вакуумные состояния, не инвариантные относительно калибровочных преобразований, рассматриваются в квантовой теории поля, и они отвечают теориям со спонтанным нарушением калибровочной симметрии.

и при трансляциях оператор приобретает фазу

$$\mathbf{a}(\mathbf{p}) \mapsto e^{-\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot \mathbf{dx}} \mathbf{a}(\mathbf{p}).$$

После калибровочного преобразования оператора уничтожения (6.15) получим

$$i\hbar \nabla_k^u \mathbf{a}_u(\mathbf{p}) = [\hat{p}_k, \mathbf{a}_u(\mathbf{p})].$$

Отсюда, вычисляя простейший коммутатор

$$\left[\hat{p}_k, e^{-iu \frac{e}{\hbar c}} \right] = \frac{e}{c} e^{-iu \frac{e}{\hbar c}} \partial_k u,$$

находим

$$i\hbar \nabla_k^u \mathbf{a}_u(\mathbf{p}) = \mathbf{a}_u(\mathbf{p}) \left(p_k + \frac{e}{c} \partial_k u \right),$$

так что трансляции дают

$$\mathbf{a}_u(\mathbf{p}) \mapsto e^{-\frac{i}{\hbar} (p_k + e \partial_k u / c) \mathbf{dx}^k} \mathbf{a}_u(\mathbf{p}),$$

что и следовало ожидать, поскольку изменение дополнительной фазы, обусловленной калибровочным преобразованием, и должно быть

$$-\frac{ie}{\hbar c} \delta u = -\frac{ie}{\hbar c} \partial_k u \mathbf{dx}^k.$$

При этом однако приходится переопределять ковариантную производную

$$\nabla_k = \partial_k \mapsto \nabla_k^u = \partial_k - i \frac{e}{\hbar c} \partial_k u,$$

куда входит теперь продольное поле $\partial_k u$, которое является нефизическим, потому что смена базиса состояний не может приводить к новым наблюдаемым физическим явлениям. Это означает, во-первых, что действие остается инвариантным при калибровочных преобразованиях

$$\delta_u S = 0 \Rightarrow \frac{\delta S}{\delta u(x)} = \frac{1}{c} \partial_k j^k(x) = 0, \quad (6.16)$$

т.е. имеет место закон сохранения тока. Во-вторых, продольное поле, как мы видели, является нефизическим, если только оно является компонентой 4-вектора, представляющего собой безмассовое калибровочное векторное поле. Значит, ковариантная производная —

$$\nabla_k = \partial_k + i \frac{e}{\hbar c} \mathcal{A}_k, \quad (6.17)$$

так что при калибровочных преобразованиях

$$\mathcal{A}_k^u = \mathcal{A}_k + \partial_k u, \quad (6.18)$$

и следовательно, ковариантная производная сохраняет свой вид

$$\nabla_k^u = \partial_k + i \frac{e}{\hbar c} \mathcal{A}_k^u.$$

Тогда при трансляциях оператор уничтожения, а значит и поле, приобретают фазу

$$\alpha(\mathbf{p}) \mapsto e^{-\frac{i}{\hbar} \left(p_k - \frac{e}{c} \mathcal{A}_k \right) dx^k} \alpha(\mathbf{p}).$$

Значит, для определения фазы поля при трансляциях необходимо просто задать калибровочное поле или, как говорят математики, связность $\mathcal{A}_k(x)$.

Для пары бесконечно малых сдвигов

$$T_{1,2} = \mathbb{1} + dx_{1,2}^k \nabla_k$$

последовательное действие двух трансляций из точки x^k в точку $x^k + dx_1^k + dx_2^k$ в прямом и обратном порядке дает поле, которое может отличаться только фазой

$$T_2 T_1 = T_1 T_2 \omega(x), \quad \omega = e^{-i\delta u \frac{e}{\hbar c}}.$$

Эта разность фаз δu наблюдаема, потому что перенос одного и того же физического состояния системы по двум путям из одной точки в другую приведет, вообще говоря, к наличию интерференции состояний. В пределе инфинитезимальных трансляций

$$T_1 T_2 - T_2 T_1 = [T_1, T_2] = [\nabla_k, \nabla_n] dx_1^k dx_2^n$$

и при

$$\omega = 1 - i\delta u \frac{e}{\hbar c}$$

находим

$$i\delta u \frac{e}{\hbar c} = [\nabla_k, \nabla_n] dx_1^k dx_2^n.$$

Коммутатор выражается через напряженность калибровочного поля:

$$[\nabla_k, \nabla_n] = [\partial_k + i \frac{e}{\hbar c} \mathcal{A}_k, \partial_n + i \frac{e}{\hbar c} \mathcal{A}_n] = i \frac{e}{\hbar c} (\partial_k \mathcal{A}_n - \partial_n \mathcal{A}_k) = i \frac{e}{\hbar c} F_{kn},$$

так что

$$\delta u = F_{kn} dx_1^k dx_2^n.$$

Таким образом, разность фаз, а значит, и интерференция возникают только, если напряженность калибровочного поля не равна нулю, т.е. в системе есть динамическое безмассовое векторное поле. Если же калибровочное поле — «чистая калибровка», то никаких наблюдаемых эффектов не возникает.

Подчеркнем также особый случай: контур трансляций охватывает область, где напряженность поля не равна нулю, в то время как на самом контуре напряженность поля — тождественный нуль. Тогда говорят, что имеет место ситуация «пространства с дыркой». Ее можно осуществить физически, помещая в систему бесконечно длинный соленоид с магнитным полем. При этом, калибровочное поле — «чистая калибровка» вне соленоида, но внутри соленоида оно отвечает наблюдаемому магнитному полю, так что непрерывная функция поля не является калибровкой во всем пространстве. Тогда изменение фазы является наблюдаемым: это — эффект Ааронова–Бома.

Итак, локальное калибровочное преобразование базиса состояний в фоковском пространстве приводит к необходимости введения в теорию динамического безмассового векторного поля путем «удлинения производных», т.е. введения обобщенного импульса

$$\hat{p}_k \mapsto \hat{P}_k = \hat{p}_k - \frac{e}{c} \mathcal{A}_k, \quad \hat{p}_k = i\hbar \partial_k, \quad (6.19)$$

который дает взаимодействие заряженных полей с калибровочным полем. Такой вид взаимодействия называют минимальным, так как, наряду с такими взаимодействиями, калибровочная инвариантность не запрещает вводить дополнительные калибровочно инвариантные слагаемые в действие. Второй важнейший вывод — калибровочное поле \mathcal{A}_k является динамическим безмассовым векторным полем, и следовательно, у него есть собственный кинетический член, который определяется коммутатором ковариантных производных

$$[\nabla_k, \nabla_n] = i \frac{e}{\hbar c} F_{kn}, \quad (6.20)$$

т.е. напряженностью поля, уже известным нам образом

$$S_{\text{gauge}} = -\frac{1}{4c} \int d^4x F_{kn} F^{kn}. \quad (6.21)$$

Действие для поля Дирака, взаимодействующего с калибровочным полем, —

$$S = \int d^4x \left\{ \bar{\psi} \left(\not{p} - \frac{e}{c} \mathcal{A} - mc \right) \psi \right\} + S_{\text{gauge}}. \quad (6.22)$$

Член с взаимодействием представим в виде

$$S_{\text{int}} = -\frac{e}{c} \int d^4x \bar{\psi} \mathcal{A} \psi = -\frac{1}{c} \int d^4x \mathcal{A}_k j^k,$$

где, конечно,

$$j^k = e \bar{\psi} \gamma^k \psi$$

есть 4-вектор тока фермиона. Значит, взаимодействие построено по типу ток–источник.

Для скалярного комплексного поля Кляйна–Гордона–Фока

$$S = \int d^4x \left\{ -\frac{1}{2c\hbar^2} \left(\left[p_k - \frac{e}{c} \mathcal{A}_k \right] \phi \right)^\dagger \left[p_k - \frac{e}{c} \mathcal{A}_k \right] \phi - \frac{1}{2} \left(\frac{mc}{\hbar} \right)^2 \phi^\dagger \phi \right\} + S_{\text{gauge}}. \quad (6.23)$$

Отметим, что взаимодействие для скалярного поля содержит вклад, квадратичный по калибровочному полю.

6.3. «Релятивистский» атом водорода: спектр

6.3.1. «Скалярный» электрон

Исторически Шредингер при формулировке волновой квантовой механики решил задачу о релятивистском атоме водорода для случая скалярного поля.

Фиксируем калибровку электростатического поля условием

$$\mathcal{A} \equiv 0,$$

так что

$$\mathcal{A}_0(r) = -\frac{e}{r}$$

есть кулоновский потенциал притяжения для заряда e . Тогда уравнение Кляйна–Гордона–Фока для стационарных связанных уровней примет вид

$$\left\{ \left(p_0 + \frac{e^2}{cr} \right)^2 - \mathbf{p}^2 - (mc)^2 \right\} \phi(x) = 0, \quad (6.24)$$

где $p_0 = E/c$ выражается через искомую энергию E ,

$$\phi(x) = e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \phi(\mathbf{r}),$$

а \mathbf{p} — оператор импульса. Тогда основное уравнение сводится к виду

$$\left\{ \frac{\mathbf{p}^2}{2m} - \frac{E}{mc^2} \frac{e^2}{r} - \frac{e^4}{c^2} \frac{1}{2mr^2} \right\} \phi(\mathbf{r}) = \frac{E^2 - (mc^2)^2}{2mc^2} \phi(\mathbf{r}). \quad (6.25)$$

Это — уравнение со сферической симметрией, так что его решения можно искать в виде

$$\phi(\mathbf{r}) = \frac{u(r)}{r} Y_{l,m}(\theta, \varphi),$$

где Y — сферические гармоники. Радиальное уравнение для функции $u(r)$ принимает вид

$$\left\{ \frac{p_r^2}{2m} - \frac{E}{mc^2} \frac{e^2}{r} + \frac{\hbar^2}{2mr^2} \left(l(l+1) - \frac{e^4}{\hbar^2 c^2} \right) \right\} u(r) = \frac{E^2 - (mc^2)^2}{2mc^2} u(r),$$

или после введения постоянной тонкой структуры и «энергии связи» ϵ :

$$\frac{e^2}{\hbar c} = \alpha_{\text{em}}, \quad \epsilon = \frac{E^2 - (mc^2)^2}{2mc^2},$$

находим

$$\left\{ \frac{p_r^2}{2m} - \frac{E}{mc^2} \frac{e^2}{r} + \frac{\hbar^2}{2mr^2} [l(l+1) - \alpha_{\text{em}}^2] \right\} u(r) = \epsilon u(r). \quad (6.26)$$

Таким образом, мы свели задачу к решению того же уравнения, что и в теории нерелятивистского атома водорода, с точностью до нормировки заряда кулоновского притяжения

$$e^2 \mapsto \frac{E}{mc^2} e^2,$$

и переопределения орбитального квантового числа

$$l(l+1) \mapsto \lambda(\lambda+1) = l(l+1) - \alpha_{\text{em}}^2,$$

так что

$$\lambda = l - \delta_l, \quad (6.27)$$

и уравнение для δ_l

$$\delta_l^2 - \delta_l(2l+1) + \alpha_{\text{em}}^2 = 0$$

имеет решение, отвечающее положительным значениям λ , что необходимо для регулярности функции $u(r)$ в нуле⁸:

$$\delta_l = l + \frac{1}{2} - \sqrt{\left(l + \frac{1}{2}\right)^2 - \alpha_{\text{em}}^2}. \quad (6.28)$$

⁸Если заряд ядра равен Z , то выражение для сдвига δ_l принимает вид

$$\delta_l = l + \frac{1}{2} - \sqrt{\left(l + \frac{1}{2}\right)^2 - Z^2 \alpha_{\text{em}}^2}.$$

При $Z\alpha_{\text{em}} > 1/2$ величина δ_0 приобретает мнимую добавку. Тогда говорят о катастрофе, связанной со слишком большим вкладом притягивающего потенциала $1/r^2$. Физической причиной для возникновения такой формальной катастрофы служит некорректность применения одночастичного уравнения в сильных электрических полях, которые приводят к большим флуктуациям поля, в том числе и числа частиц.

Нормируемые решения уравнения отвечают

$$\epsilon_n = -\frac{mc^2}{2n^2} \alpha_{\text{em}}^2 \quad \mapsto \quad \epsilon_\nu = -\frac{mc^2}{2\nu^2} \frac{E^2}{m^2 c^4} \alpha_{\text{em}}^2 = \frac{\alpha_{\text{em}}^2}{2\nu^2} \frac{E^2}{mc^2},$$

где

$$n = 1 + l + n_r \quad \mapsto \quad \nu = 1 + \lambda + n_r, \quad n_r \in \{0, \mathbb{N}\}.$$

Подставляя определение ϵ через энергию, легко находим «точную формулу» для энергии связанного состояния

$$E = \frac{mc^2}{\sqrt{1 + \frac{\alpha_{\text{em}}^2}{\nu^2}}}, \quad (6.29)$$

или энергию связи

$$\mathcal{E}_\nu = E - mc^2 = \frac{mc^2}{\sqrt{1 + \frac{\alpha_{\text{em}}^2}{\nu^2}}} - mc^2.$$

Во втором приближении по малому параметру α_{em}^2 разложение в ряд Тейлора дает

$$\mathcal{E}_\nu \approx -\frac{mc^2}{2\nu^2} \alpha_{\text{em}}^2 \left(1 - \frac{3}{4} \frac{\alpha_{\text{em}}^2}{\nu^2} \right),$$

где еще необходимо провести разложение

$$\frac{1}{\nu^2} = \frac{1}{(n - \delta_l)^2} \approx \frac{1}{n^2} \left(1 + 2 \frac{\delta_l}{n} \right),$$

где

$$\delta_l \approx \frac{\alpha_{\text{em}}^2}{2l + 1}.$$

В итоге,

$$\mathcal{E}_{n,l} \approx -\frac{mc^2}{2n^2} \alpha_{\text{em}}^2 \left\{ 1 + \frac{\alpha_{\text{em}}^2}{n^2} \left(\frac{2n}{2l + 1} - \frac{3}{4} \right) \right\}. \quad (6.30)$$

Как видим, релятивистская поправка снимает вырождение по орбитальному моменту l между уровнями с заданным значением главного квантового числа n . Однако, эксперимент однозначно опровергает такое значение расщепления, например, для уровней $2s$ и $2p$. Поэтому Шредингеру пришлось ограничиться ведущим нерелятивистским приближением в задаче для атома водорода. Причина расхождения кроется, конечно, в наличии спина у электрона.

6.3.2. «Релятивистский» электрон

Стационарное уравнение Дирака для электрона в кулоновском поле протона имеет вид

$$(\not{P} - mc) \psi(\mathbf{r}) = 0,$$

где

$$P_0 = \frac{E}{c} + \frac{e^2}{cr},$$

и

$$\psi(x) = e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \psi(\mathbf{r}).$$

Умножение уравнения на $(\not{P} + mc)$ дает

$$\left\{ \left(p_0 + \frac{e^2}{cr} \right)^2 - \mathbf{p}^2 - (mc)^2 - \boldsymbol{\gamma} \cdot \mathbf{p} \gamma_0 \frac{e^2}{cr} \right\} \psi(\mathbf{r}) = 0,$$

где дополнительный по сравнению с уравнением для скалярного поля вклад после дифференцирования сводится к

$$i\gamma_5 \frac{\hbar^2 \alpha_{\text{em}}}{r^2} (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}),$$

где $\mathbf{n} = \mathbf{r}/r$. Этот член сохраняет пространственную четность, так как при отражении пространства $\gamma_5 \mapsto -\gamma_5$, $\mathbf{n} \mapsto -\mathbf{n}$, а псевдовектор спина $\boldsymbol{\sigma}$ сохраняется. В итоге, в полной аналогии со случаем скалярного поля приходим к уравнению на собственные значения энергии

$$\left\{ \frac{\mathbf{p}^2}{2m} - \frac{E}{mc^2} \frac{e^2}{r} - \frac{\hbar^2 \alpha_{\text{em}}}{2mr^2} [\alpha_{\text{em}} + i\gamma_5 (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n})] \right\} \psi(\mathbf{r}) = \epsilon \psi(\mathbf{r}). \quad (6.31)$$

Поскольку

$$[l_\alpha, (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n})] = i\epsilon_{\alpha\beta\gamma} \sigma_\beta n_\gamma, \quad [s_\alpha, (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n})] = i\epsilon_{\alpha\beta\gamma} n_\beta \sigma_\gamma,$$

в задаче сохраняется полный момент

$$\mathbf{j} = \mathbf{l} + \boldsymbol{\sigma}$$

и его квадрат. Кроме того, инвариантность относительно пространственной инверсии означает, что P -четность — квантовое число. При сложении орбитального момента со спином $1/2$ при заданном j допустимы только 2 значения

$$l_\pm = j \pm \frac{1}{2},$$

которые отличаются знаком P -четности. Поэтому будем характеризовать состояние полным набором $\{E, j, m, l\}$, где j — полный момент, m — его проекция на заданную ось, l — орбитальный момент, дающий $P = (-1)^l$.

В киральном представлении гамма-матриц Дирака γ_5 диагональна

$$\gamma_5 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix},$$

поэтому уравнение (6.31) для биспинора

$$\psi(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} \Psi_+(\mathbf{r}) \\ \Psi_-(\mathbf{r}) \end{pmatrix}$$

разделяется на пару независимых уравнений для двухкомпонентных спиноров $\Psi_\pm(\mathbf{r})$:

$$\left\{ \frac{\mathbf{p}^2}{2m} - \frac{E}{mc^2} \frac{e^2}{r} - \frac{\hbar^2 \alpha_{\text{em}}}{2mr^2} [\alpha_{\text{em}} \pm i(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n})] \right\} \Psi_\pm(\mathbf{r}) = \epsilon \Psi_\pm(\mathbf{r}). \quad (6.32)$$

Двухкомпонентные спиноры можно представить в виде суперпозиции состояний с заданным орбитальным моментом l

$$\Psi_{\pm}(\mathbf{r}) = a_{\pm}\phi_{l_{\pm}}^{j,m}(\mathbf{r}) + b_{\pm}\phi_{l_{\mp}}^{j,m}(\mathbf{r}),$$

так что пространственная инверсия биспинора дает

$$\psi(\mathbf{r}) \xrightarrow{\mathbb{P}} \gamma_0 \psi(-\mathbf{r}) = (-1)^{l_{+}} \begin{pmatrix} a_{-}\phi_{l_{+}}^{j,m}(\mathbf{r}) - b_{-}\phi_{l_{-}}^{j,m}(\mathbf{r}) \\ a_{+}\phi_{l_{+}}^{j,m}(\mathbf{r}) - b_{+}\phi_{l_{-}}^{j,m}(\mathbf{r}) \end{pmatrix}.$$

Значит, биспинор имеет четность $(-1)^{l_{+}}$, если

$$a_{-} = a_{+}, \quad b_{-} = -b_{+}, \quad P = (-1)^{l_{+}},$$

и $(-1)^{l_{-}}$, если

$$a_{-} = -a_{+}, \quad b_{-} = b_{+}, \quad P = (-1)^{l_{-}}.$$

Сами спиноры $\phi_{l_{\pm}}^{j,m}$ построены согласно правилам сложения двух моментов. Поэтому

$$l^2 \phi_{l_{\pm}}^{j,m} = l_{\pm}(l_{\pm} + 1) \phi_{l_{\pm}}^{j,m}.$$

Так как оператор $(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n})$ обладает отрицательной P -четностью и его квадрат равен единице, можно выбрать фазы спиноров $\phi_{l_{\pm}}^{j,m}$ так, чтобы

$$(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}) \phi_{l_{\pm}}^{j,m} = \phi_{l_{\mp}}^{j,m}.$$

Значит, этот оператор смешивает состояния $\phi_{l_{\pm}}^{j,m}$ в уравнении (6.32), причем матрица, соответствующая вкладу орбитального движения

$$\frac{\hbar^2}{2mr^2} [l^2 - \alpha_{\text{em}}^2 \mp i \alpha_{\text{em}} (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n})]$$

в базисе $\phi_{l_{\pm}}^{j,m}$ имеет вид

$$\frac{\hbar^2}{2mr^2} \begin{pmatrix} l_{+}(l_{+} + 1) - \alpha_{\text{em}}^2 & \mp i \alpha_{\text{em}} \\ \mp i \alpha_{\text{em}} & l_{-}(l_{-} + 1) - \alpha_{\text{em}}^2 \end{pmatrix} = \frac{\hbar^2}{2mr^2} A.$$

Найдем собственные значения z для

$$A = \begin{pmatrix} j^2 + 2j + \frac{3}{4} - \alpha_{\text{em}}^2 & \mp i \alpha_{\text{em}} \\ \mp i \alpha_{\text{em}} & j^2 - \frac{1}{4} - \alpha_{\text{em}}^2 \end{pmatrix},$$

где мы подставили $l_{\pm} = j \pm 1/2$. Уравнение

$$\det(A - z) = \left[\left(j + \frac{1}{2} \right)^2 - \alpha_{\text{em}}^2 - z + j + \frac{1}{2} \right] \left[\left(j + \frac{1}{2} \right)^2 - \alpha_{\text{em}}^2 - z - j - \frac{1}{2} \right] + \alpha_{\text{em}}^2 = 0$$

легко решается, так что

$$\left(j + \frac{1}{2} \right)^2 - \alpha_{\text{em}}^2 - z = \pm \sqrt{\left(j + \frac{1}{2} \right)^2 - \alpha_{\text{em}}^2},$$

и

$$z = \sqrt{\left(j + \frac{1}{2}\right)^2 - \alpha_{\text{em}}^2} \left(\sqrt{\left(j + \frac{1}{2}\right)^2 - \alpha_{\text{em}}^2} \pm 1 \right). \quad (6.33)$$

Значит, собственные значения можно представить в виде

$$z = \lambda(\lambda + 1), \quad \lambda = j \pm \frac{1}{2} - \delta_j = l_{\pm} - \delta_j,$$

где уже

$$\delta_j = j + \frac{1}{2} - \sqrt{\left(j + \frac{1}{2}\right)^2 - \alpha_{\text{em}}^2}. \quad (6.34)$$

Собственные значения для верхних и нижних спиноров, очевидно, совпадают, причем коэффициенты смешивания a_{\pm} и b_{\pm} удовлетворяют условиям построения биспиноров с заданной четностью.

В базисе собственных векторов матрицы получаем уравнение, опять имеющее вид уравнения для нерелятивистского атома водорода

$$\left\{ \frac{p_r^2}{2m} - \frac{E}{mc^2} \frac{e^2}{r} + \frac{\hbar^2}{2mr^2} \lambda(\lambda + 1) \right\} u(r) = \epsilon u(r),$$

и повторяя выкладки, аналогичные случаю скалярного поля, находим спектр связанных состояний

$$E = \frac{mc^2}{\sqrt{1 + \frac{\alpha_{\text{em}}^2}{\nu^2}}}, \quad (6.35)$$

где уже

$$\nu = 1 + n_r + l_{\pm} - \delta_j = n_{\pm} - \delta_j.$$

Поэтому для заданного главного квантового числа n мы имеем двукратное вырождение по орбитальному моменту l (разные значения радиального квантового числа n_r) при фиксированном значении полного момента j , если, конечно, $n > 1$ и $n > j + 1/2$, потому что в случае равенств возможны только значения $l = 0$ и $l = j - 1/2$, соответственно, при $n_r = 0$.

Разложение энергии связи в ряд по константе тонкого расщепления α_{em} дает

$$\mathcal{E}_{n,l} \approx -\frac{mc^2}{2n^2} \alpha_{\text{em}}^2 \left\{ 1 + \frac{\alpha_{\text{em}}^2}{n^2} \left(\frac{2n}{2j+1} - \frac{3}{4} \right) \right\}. \quad (6.36)$$

Теперь значение расщепления уровней с заданным n в зависимости от j дает прекрасное согласие с экспериментами по измерению спектров в атоме водорода. Состояния электрона принято характеризовать тройкой квантовых чисел nl_j .

Поправки высшего порядка имеют однако уже другую природу: они определяются не только высшими членами разложения релятивистского выражения, а обусловлены взаимодействием спина электрона со спином ядра – сверхтонкое расщепление, и флуктуациями электромагнитного поля при наличии зарядов – лэмбовский сдвиг s -волновых уровней.

Проведенное нами рассмотрение спектра атома водорода из релятивистского уравнения Дирака укрывает от глаза осознание динамической природы поправок в терминах, допускающих ясную физическую трактовку. Поэтому проведем систематическое построение гамильтоновой динамики электрона в виде последовательного учета релятивистских эффектов в виде возмущения к ведущему нерелятивистскому вкладу.

Тема 4

Нерелятивистское приближение: эффективная теория

Лекция № 7

Операторное уравнение для двухкомпонентного спинора во внешнем поле в одночастичном приближении, разложение операторов в ряд по малому отношению v/c , ведущий вклад в нерелятивистское приближение, эффективное действие для спиноров Паули, магнитный момент электрона и фактор Ланде $g = 2$, поправки к эффективному действию в случае движения в статическом потенциале, роль нормировки заряда на единицу, природа кинетической поправки, спин-орбитального взаимодействия и дарвиновского члена, учет томасовского вращения спина при неинерциальном движении, локализация электрона и область применимости нерелятивистского приближения, комптоновская длина, релятивистские поправки как возмущение в атоме водорода, квантовые числа электрона и формула для поправки к энергии, снятие вырождения по полному моменту и остаточное вырождение по орбитальному моменту, введение аномального магнитного момента, швингеровское значение, полученное в теории возмущений из квантовых петлевых поправок, задача о магнитном моменте протона и нейтрона в кварковой модели.

7.1. Построение эффективного действия

Рассмотрим поле Дирака во внешнем поле в случае, когда энергия частицы мало отличается от энергии покоя, т.е. сделаем подстановку

$$\psi(t, \mathbf{r}) = e^{-\frac{i}{\hbar} mc^2 t} \begin{pmatrix} \varphi(t, \mathbf{r}) \\ \chi(t, \mathbf{r}) \end{pmatrix}, \quad (7.1)$$

где φ и χ — двухкомпонентные спиноры в представлении Дирака для гамма-матриц, так что уравнение Дирака $(\mathcal{P} - mc)\psi = 0$ с обобщенным импульсом $\mathcal{P}_k = i\hbar\partial_k - \frac{e}{c}\mathcal{A}_k$ принимает вид

$$\begin{pmatrix} p_0 - \frac{e}{c}\phi - mc & (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathcal{P}) \\ -(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathcal{P}) & -p_0 + \frac{e}{c}\phi - mc \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} = 0, \quad (7.2)$$

где $p_0 = mc + \hat{e}/c$ и оператор $\hat{e} = i\hbar\partial_t$, так что получаем систему

$$\begin{cases} 0 = (\hat{e} - e\phi)\varphi + c(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathcal{P})\chi, \\ 0 = c(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathcal{P})\varphi + (2mc^2 + \hat{e} - e\phi)\chi, \end{cases} \quad (7.3)$$

которую можно разрешить относительно χ :

$$\chi = -\frac{1}{1 + \frac{\hat{e} - e\phi}{2mc^2}} \frac{(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathcal{P})}{2mc} \varphi, \quad (7.4)$$

причем здесь необходимо внимательно следить за тем, чтобы соблюдать порядок следования операторов. Обозначим для упрощения записи

$$\frac{1}{1 + \frac{\hat{\epsilon} - e\phi}{2mc^2}} = 1 + \hat{\mathcal{W}}. \quad (7.5)$$

Тогда

$$\chi = -(1 + \hat{\mathcal{W}}) \frac{(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{P})}{2mc} \varphi.$$

Используя этот результат, запишем

$$c\bar{\psi}(\mathcal{P} - mc)\psi = \varphi^\dagger \{(\hat{\epsilon} - e\phi)\varphi + c(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{P})\chi\} = \varphi^\dagger \left\{ \hat{\epsilon} - e\phi - \frac{1}{2m}(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{P})(1 + \hat{\mathcal{W}})(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{P}) \right\} \varphi.$$

Значит, действие для поля Дирака во внешнем поле примет вид

$$S_D = \int d^4x \bar{\psi}(\mathcal{P} - mc)\psi = \int dt \int d^3\mathbf{r} \varphi^\dagger \left\{ \hat{\epsilon} - e\phi - \frac{1}{2m}(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{P})(1 + \hat{\mathcal{W}})(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{P}) \right\} \varphi. \quad (7.6)$$

Плотность заряда $ej^0 = e\bar{\psi}\gamma^0\psi = e\psi^\dagger\psi = e(\varphi^\dagger\varphi + \chi^\dagger\chi)$ запишется как

$$ej^0 = e\varphi^\dagger \left\{ 1 + \frac{1}{4m^2c^2}(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{P})(1 + \hat{\mathcal{W}})^2(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{P}) \right\} \varphi. \quad (7.7)$$

Выражения для действия и плотности заряда (7.6) и (7.7) являются *точными*, но они содержат сложные обратные операторы, которые формально можно разложить в ряд. Например,

$$1 + \hat{\mathcal{W}} = \frac{1}{1 + \frac{\hat{\epsilon} - e\phi}{2mc^2}} = 1 - \frac{\hat{\epsilon} - e\phi}{2mc^2} + \dots \quad (7.8)$$

Следует ожидать, что ряд сходится, если вклады

$$\left| \frac{\hat{\epsilon} - e\phi}{2mc^2} \right| \ll 1.$$

Очевидно, это имеет место, если поле слабое и энергия частицы в нем мала по сравнению с массой покоя. Таким образом, проведенные преобразования поля Дирака могут служить основой для нерелятивистского приближения.

Ведущее приближение. Полагая $\hat{\mathcal{W}} \rightarrow 0$, с точностью до вкладов порядка $\mathcal{O}(1/c^2)$ находим для плотности тока

$$ej^0 \approx e\varphi^\dagger\varphi, \quad (7.9)$$

а значит, нормируя двухкомпонентный спинор φ условием

$$\int d^3\mathbf{r} \varphi^\dagger\varphi = 1,$$

получаем поле с единичным зарядом, что соответствует одночастичному приближению.

Отметим, что в нерелятивистском разложении нижняя компонента χ дираковского биспинора подавлена по сравнению с верхней компонентой φ отношением $|\mathbf{p}|/mc$, т.е. как

$\mathcal{O}(v/c)$, где v — скорость движения частицы. Поэтому верхнюю компоненту часто называют “большой”, а нижнюю “малой”.

В том же порядке по обратной скорости света, действие для спинора φ принимает вид

$$S_{\text{NR}} = \int dt \int d^3\mathbf{r} \varphi^\dagger \left\{ \hat{\epsilon} - e\phi - \frac{1}{2m} (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{P})^2 \right\} \varphi. \quad (7.10)$$

Согласно алгебре сигма-матриц Паули

$$(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{P})^2 = \mathbf{P}^2 + i\boldsymbol{\sigma} (\mathbf{P} \times \mathbf{P}).$$

Векторное произведение

$$(\mathbf{P} \times \mathbf{P})_\alpha = \epsilon_{\alpha\beta\gamma} \left(-i\hbar\partial_\beta - \frac{e}{c} \mathcal{A}_\beta \right) \left(-i\hbar\partial_\gamma - \frac{e}{c} \mathcal{A}_\gamma \right) = i\frac{\hbar e}{c} \epsilon_{\alpha\beta\gamma} (\partial_\beta \mathcal{A}_\gamma - \mathcal{A}_\gamma \partial_\beta),$$

так что

$$(\mathbf{P} \times \mathbf{P}) = i\frac{\hbar e}{c} \text{rot} \mathbf{A} = i\frac{\hbar e}{c} \boldsymbol{\mathcal{H}}. \quad (7.11)$$

В итоге,

$$S_{\text{NR}} = \int dt \int d^3\mathbf{r} \varphi^\dagger \left\{ \hat{\epsilon} - e\phi - \frac{\mathbf{P}^2}{2m} + \frac{e\hbar}{2mc} (\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\mathcal{H}}) \right\} \varphi. \quad (7.12)$$

Вариация действия по φ^\dagger приводит к уравнению Паули для нерелятивистского спинора

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \varphi = \hat{H}_{\text{NR}} \varphi, \quad (7.13)$$

с гамильтонианом

$$\hat{H}_{\text{NR}} = \frac{\mathbf{P}^2}{2m} + e\phi - g \frac{e\hbar}{2mc} (\mathbf{s} \cdot \boldsymbol{\mathcal{H}}), \quad (7.14)$$

где оператор спина $\mathbf{s} = \frac{1}{2} \boldsymbol{\sigma}$ и “жэ-фактор” Ланде

$$g = 2.$$

Этот результат явился ярчайшим успехом теории Дирака: он позволил объяснить наблюдаемое экспериментально значение фактора Ланде, исходя из релятивистского уравнения с минимальным взаимодействием калибровочного типа. Кроме того, поскольку Дирак вывел свое уравнение эвристическим путем, именно нерелятивистское приближение позволило ему установить, что полученное им релятивистское уравнение описывает частицу со спином $1/2$.

Релятивистские поправки для статического потенциала. В случае $\mathbf{A} = 0$ с учетом поправок порядка $1/c^2$ плотность тока имеет вид

$$ej^0 \approx e \varphi^\dagger \left\{ 1 + \frac{\mathbf{p}^2}{4m^2 c^2} \right\} \varphi. \quad (7.15)$$

Введем

$$\varphi_{\text{NR}} = \left\{ 1 + \frac{\mathbf{p}^2}{8m^2 c^2} \right\} \varphi. \quad (7.16)$$

Тогда с точностью до высших поправок

$$ej^0 \approx e \varphi_{\text{NR}}^\dagger \varphi_{\text{NR}}, \quad (7.17)$$

а значит, нормировка

$$\int d^3 \mathbf{r} \varphi_{\text{NR}}^\dagger \varphi_{\text{NR}} = 1 \quad (7.18)$$

обеспечивает интерпретацию φ_{NR} в качестве волновой функции одночастичного состояния с точностью до $1/c^2$.

С учетом ведущего приближения и первой поправки к

$$\hat{\mathcal{W}} \approx -\frac{\hat{\epsilon} - e\phi}{2mc^2}$$

действие

$$S \approx \int dt \int d^3 \mathbf{r} \varphi^\dagger \left\{ \hat{\epsilon} - e\phi - \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + \frac{1}{4m^2 c^2} (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}) (\hat{\epsilon} - e\phi) (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}) \right\} \varphi.$$

Очевидно, что

$$(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}) \hat{\epsilon} (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}) = \hat{\epsilon} \mathbf{p}^2,$$

в то время как

$$(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}) \phi (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}) = \phi \mathbf{p}^2 - i\hbar \{ \nabla \phi \cdot \mathbf{p} + i\boldsymbol{\sigma} \cdot (\nabla \phi \times \mathbf{p}) \},$$

где ∇ действует на потенциал ϕ . Значит,

$$S \approx \int dt \int d^3 \mathbf{r} \varphi^\dagger \left\{ \hat{\epsilon} \left(1 + \frac{\mathbf{p}^2}{4m^2 c^2} \right) - e\phi - \frac{\mathbf{p}^2}{2m} - \frac{e}{4m^2 c^2} \left(\phi \mathbf{p}^2 - i\hbar \{ \nabla \phi \cdot \mathbf{p} + i\boldsymbol{\sigma} \cdot (\nabla \phi \times \mathbf{p}) \} \right) \right\} \varphi.$$

Теперь в этом выражении необходимо перейти к нормированному нерелятивистскому спинору

$$\varphi = \left\{ 1 - \frac{\mathbf{p}^2}{8m^2 c^2} \right\} \varphi_{\text{NR}}.$$

Тогда вклад энергии с заданной точностью

$$\varphi^\dagger \hat{\epsilon} \left(1 + \frac{\mathbf{p}^2}{4m^2 c^2} \right) \varphi \approx \varphi_{\text{NR}}^\dagger \hat{\epsilon} \varphi_{\text{NR}},$$

вклад кинетического члена

$$\varphi^\dagger \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \varphi \approx \varphi_{\text{NR}}^\dagger \left\{ \frac{\mathbf{p}^2}{2m} - \frac{\mathbf{p}^4}{8m^3 c^2} \right\} \varphi_{\text{NR}},$$

и наконец, вклад потенциала

$$\varphi^\dagger \phi \varphi \approx \varphi_{\text{NR}}^\dagger \left\{ \phi - \frac{1}{8m^2 c^2} (\mathbf{p}^2 \phi + \phi \mathbf{p}^2) \right\} \varphi_{\text{NR}}.$$

Простым дифференцированием находим

$$\mathbf{p}^2 \phi = \phi \mathbf{p}^2 - 2i\hbar \nabla \phi \cdot \mathbf{p} - \hbar^2 \Delta \phi.$$

Для поправки порядка $1/c^2$

$$\varphi^\dagger \{ \nabla \phi \cdot \mathbf{p} + i \boldsymbol{\sigma} \cdot (\nabla \phi \times \mathbf{p}) \} \varphi \approx \varphi_{\text{NR}}^\dagger \{ \nabla \phi \cdot \mathbf{p} + i \boldsymbol{\sigma} \cdot (\nabla \phi \times \mathbf{p}) \} \varphi_{\text{NR}}.$$

Суммируя подобные члены, находим эффективное действие для нерелятивистского спинора

$$S \approx \int dt \int d^3 \mathbf{r} \varphi_{\text{NR}}^\dagger \left\{ \hat{\epsilon} - e\phi - \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + \frac{\mathbf{p}^4}{8m^3 c^2} - \frac{e\hbar}{4m^2 c^2} \boldsymbol{\sigma} \cdot (\nabla \phi \times \mathbf{p}) - \frac{e\hbar^2}{8m^2 c^2} \Delta \phi \right\} \varphi_{\text{NR}}. \quad (7.19)$$

Если потенциал является центрально симметричным, то

$$\nabla \phi(r) = \frac{\phi'(r)}{r} \mathbf{r},$$

и с учетом определения орбитального момента $\mathbf{L} = (\mathbf{r} \times \mathbf{p})$

$$S \approx \int dt \int d^3 \mathbf{r} \varphi_{\text{NR}}^\dagger \left\{ \hat{\epsilon} - e\phi - \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + \frac{\mathbf{p}^4}{8m^3 c^2} - \frac{e\hbar}{2m^2 c^2} \frac{\phi'(r)}{r} (\mathbf{s} \cdot \mathbf{L}) - \frac{e\hbar^2}{8m^2 c^2} \Delta \phi \right\} \varphi_{\text{NR}}. \quad (7.20)$$

В итоге, гамильтониан нерелятивистской частицы в статическом центрально симметричном потенциале с учетом релятивистских поправок вплоть до порядка $1/c^2$ принимает вид

$$\hat{H} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + e\phi - \frac{\mathbf{p}^4}{8m^3 c^2} + \frac{e\hbar}{2m^2 c^2} \frac{\phi'(r)}{r} (\mathbf{s} \cdot \mathbf{L}) + \frac{e\hbar^2}{8m^2 c^2} \Delta \phi. \quad (7.21)$$

Общий формализм построения эффективного гамильтониана любого порядка по обратной скорости использует преобразование Фолди–Ваутхойзена¹, которое мы здесь не рассматриваем.

7.2. Интерпретация поправок

Каждый из трех членов релятивистских поправок к движению частица со спином $1/2$ в гамильтониане (7.21) допускает вполне ясную интерпретацию.

Прежде всего, разложение релятивистского выражения для кинетической энергии по скорости

$$E = \sqrt{(mc^2)^2 + c^2 \mathbf{p}^2} = mc^2 \left(1 + \frac{1}{2} \frac{\mathbf{p}^2}{m^2 c^2} - \frac{1}{8} \frac{\mathbf{p}^4}{m^4 c^4} + \dots \right) \approx mc^2 + \frac{\mathbf{p}^2}{2m} - \frac{\mathbf{p}^4}{8m^3 c^2}$$

в точности воспроизводит релятивистскую поправку к кинетической энергии.

Вклад спин-орбитального взаимодействия требует более тщательного рассмотрения. Во-первых, электрическое поле статического потенциала $\boldsymbol{\mathcal{E}} = -\nabla \phi = -\mathbf{r} \phi'(r)/r$ при переходе в систему, сопутствующую электрону, который движется со скоростью \mathbf{v} , согласно преобразованию Лоренца в нерелятивистском пределе дает магнитное поле

$$\boldsymbol{\mathcal{H}} = -\frac{1}{c} (\mathbf{v} \times \boldsymbol{\mathcal{E}}) = -\frac{\phi'(r)}{mc r} (\mathbf{r} \times \mathbf{p}) = -\frac{\phi'(r)}{mc r} \mathbf{L}.$$

Потенциал взаимодействия магнитного диполя электрона $\boldsymbol{\mu}$ с полем: $U_{\text{mag}} = -(\boldsymbol{\mu} \cdot \boldsymbol{\mathcal{H}})$ принимает вид

$$U_{\text{mag}} = \frac{\phi'(r)}{mc r} \frac{g e \hbar}{2mc} (\mathbf{s} \cdot \mathbf{L}) = \frac{g e \hbar}{2m^2 c^2} \frac{\phi'(r)}{r} (\mathbf{s} \cdot \mathbf{L}),$$

¹Foldy–Wouthuysen.

что, однако, вдвое больше результата, выведенного из уравнения Дирака в нерелятивистском пределе, так как $g = 2$. Причина расхождения — не инерциальное, а вращательное, движение электрона в статическом потенциале, вследствие чего спин испытывает прецессию Томаса.

В нерелятивистском пределе частота прецессии равна

$$\boldsymbol{\omega} = \frac{1}{2c^2} (\dot{\mathbf{v}} \times \mathbf{v}).$$

Ускорение можно выразить из второго закона Ньютона

$$\dot{\mathbf{v}} = \frac{e}{m} \boldsymbol{\mathcal{E}} = -\frac{e}{m} \frac{\phi'(r)}{r} \mathbf{r},$$

так что

$$\boldsymbol{\omega} = -\frac{e}{2m^2c^2} \frac{\phi'(r)}{r} (\mathbf{r} \times m\mathbf{v}) = -\frac{e}{2m^2c^2} \frac{\phi'(r)}{r} \mathbf{L}.$$

Вращение спина описывается уравнением

$$\frac{d\mathbf{s}}{dt} = \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{s}.$$

В квантовой механике это уравнение получается из уравнения Гейзенберга

$$i\hbar \frac{d\mathbf{s}}{dt} = [\mathbf{s}, \hat{H}_{\text{Thomas}}],$$

если добавка к гамильтониану равна

$$\hat{H}_{\text{Thomas}} = \hbar (\mathbf{s} \cdot \boldsymbol{\omega}),$$

что сводится к

$$\hat{H}_{\text{Thomas}} = -\frac{e\hbar}{2m^2c^2} \frac{\phi'(r)}{r} (\mathbf{s} \cdot \mathbf{L}),$$

и суммарный вклад спин-орбитального взаимодействия

$$V_{sl} = (g - 1) \frac{e\hbar}{2m^2c^2} \frac{\phi'(r)}{r} (\mathbf{s} \cdot \mathbf{L}) \quad (7.22)$$

совпадает с результатом нерелятивистского приближения уравнения Дирака при $g = 2$.

Наконец, дарвиновский вклад

$$\hat{H}_{\text{Darwin}} = \frac{e\hbar^2}{8m^2c^2} \Delta\phi$$

возникает вследствие ограниченности области применения нерелятивистского одночастичного приближения. В самом деле, если частицу локализовать на расстояниях порядка комптоновской длины $\lambda = \hbar/(mc)$, то согласно соотношению неопределенности, импульс достигает релятивистских значений $p \sim mc$, что несовместимо с принятыми предположениями о сходимости разложения действия по обратным степеням скорости света. Другими словами, нерелятивистский электрон можно считать точкой только с точностью до флуктуаций

на масштабах порядка комптоновской волны. Поэтому и локальный потенциал нерелятивистского приближения — это усредненная величина. Поправка к усредненной величине потенциала за счет флуктуаций равна

$$\langle \phi(\mathbf{r}) \rangle = \phi(\bar{\mathbf{r}}) + \langle \delta \mathbf{r} \rangle \cdot \nabla \phi(\bar{\mathbf{r}}) + \frac{1}{2} \langle \delta r^\alpha \delta r^\beta \rangle \partial_\alpha \partial_\beta \phi(\bar{\mathbf{r}}) + \dots,$$

где $\bar{\mathbf{r}} = \langle \mathbf{r} \rangle$. Очевидно, что

$$\langle \delta \mathbf{r} \rangle = 0, \quad \langle \delta r^\alpha \delta r^\beta \rangle = \frac{1}{3} (\delta r)^2 \delta^{\alpha\beta},$$

и при $\delta r \sim \hbar/(mc)$ поправка сводится к

$$e\delta\phi \sim \frac{e\hbar^2}{6m^2c^2} \Delta\phi,$$

что с точностью до коэффициента дает дарвиновский вклад, точное значение которого выведено из уравнения Дирака.

Таким образом, все релятивистские поправки для частицы спина 1/2 имеют вполне ясное динамическое происхождение.

7.3. Атом водорода: поправки

В атоме водорода потенциал притяжения

$$\phi = -\frac{e}{r}.$$

Поэтому

$$\phi'(r) = \frac{e}{r^2}, \quad \Delta\phi(r) = 4\pi e \delta(\mathbf{r}),$$

так что возмущение в виде релятивистских поправок имеет вид

$$V = -\frac{\mathbf{p}^4}{8m^3c^2} + \frac{e^2\hbar}{2m^2c^2} \frac{1}{r^3} (\mathbf{s} \cdot \mathbf{L}) + \frac{e^2\hbar^2}{2m^2c^2} \pi \delta(\mathbf{r}). \quad (7.23)$$

Как видим для кулоновского случая дарвиновский член сводится к дельта-функции, поэтому его еще называют контактным. Отметим здесь, что точность в измерении спектров атома водорода столь высока, что она позволяет выделить вклад за счет неточности ядра, в частности, протона: в этом случае необходимо вместо дельта-функции поставить распределение заряда в ядре конечного радиуса.

Связанные состояния исходной системы — нерелятивистского уравнения Шредингера для атома водорода — характеризовались набором квантовых чисел: главного квантового числа n , орбитального момента l и его проекции m . При этом четность состояния определялась через l как $(-1)^l$.

Теперь из вида возмущения (7.23) видно, что квадрат орбитального момента по-прежнему является квантовым числом, так как он коммутирует с V . Четность определяется тем же соотношением и также сохраняется, потому что возмущение как функция координаты центрально симметрично, а скалярное произведение спина на момент — скаляр. Однако, ни оператор спина \mathbf{s} , ни орбитального момента $\mathbf{l} = \mathbf{L}/\hbar$ по отдельности не коммутируют с этим скаляром:

$$[s_\alpha, (\mathbf{s} \cdot \mathbf{l})] = i\epsilon_{\alpha\beta\gamma} L_\beta s_\gamma, \quad [l_\alpha, (\mathbf{s} \cdot \mathbf{l})] = i\hbar \epsilon_{\alpha\beta\gamma} l_\gamma s_\beta.$$

Зато отсюда следует, что сохраняется полный момент

$$\mathbf{j} = \mathbf{s} + \mathbf{l},$$

так же как и его квадрат. Значит, связанные состояния имеют следующие квантовые числа: главное квантовое число n , орбитальный момент l и четность $(-1)^l$, полный момент j и его проекция m_j .

Квадрат полного момента равен

$$\mathbf{j}^2 = \mathbf{l}^2 + 2(\mathbf{l} \cdot \mathbf{s}) + \mathbf{s}^2. \quad (7.24)$$

Значит, значение скаляра

$$(\mathbf{l} \cdot \mathbf{s}) = \frac{1}{2} \left\{ j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4} \right\} \quad (7.25)$$

полностью определяется квантовыми числами состояния, так что возмущение является диагональным в этом базисе (секулярное уравнение тривиально).

Для вычисления спектра с учетом релятивистских поправок остается вычислить матричные элементы возмущения по базису.

Кинетический вклад при усреднении по состоянию с квантовым числом n с помощью нерелятивистского уравнения Шредингера для энергии

$$\frac{\mathbf{p}^2}{2m} |n, l, j, m_j\rangle - \frac{e^2}{r} |n, l, j, m_j\rangle = -\frac{mc^2}{2n^2} \alpha_{\text{em}}^2 |n, l, j, m_j\rangle,$$

можно представить как

$$-\left\langle \frac{\mathbf{p}^4}{8m^3c^2} \right\rangle = -\frac{1}{2mc^2} \left\langle \left(-\frac{mc^2}{2n^2} \alpha_{\text{em}}^2 + \frac{e^2}{r} \right)^2 \right\rangle = -\frac{mc^2}{8n^4} \alpha_{\text{em}}^4 + \frac{\alpha_{\text{em}}^2}{2n^2} \left\langle \frac{e^2}{r} \right\rangle - \frac{e^4}{2mc^2} \left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle.$$

Воспроизводя результаты для атома водорода с учетом $a e^2 = \hbar^2/m$

$$\left\langle \frac{e^2}{r} \right\rangle = \frac{e^2}{a} \frac{1}{n^2} = \frac{mc^2}{n^2} \alpha_{\text{em}}^2,$$

$$\frac{e^4}{2mc^2} \left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle = \frac{e^4}{2mc^2} \frac{2}{a^2} \frac{1}{n^3(2l+1)} = \frac{mc^2}{n^3(2l+1)} \alpha_{\text{em}}^4.$$

Приведение подобных членов дает поправку к энергии

$$\delta_{\text{kin}} E = -\frac{mc^2}{2n^2} \frac{\alpha_{\text{em}}^4}{n^2} \left\{ \frac{n}{l+1/2} - \frac{3}{4} \right\}. \quad (7.26)$$

Именно эта поправка возникала из решения задачи о связанных состояниях в кулоновском поле согласно релятивистскому уравнению Кляйна–Гордона–Фока, потому что оставшиеся вклады спин-орбитального взаимодействия и дарвиновский член обусловлены спином электрона.

Спин-орбитальное взаимодействие отлично от нуля только при $l \neq 0$. Из рекуррентных соотношений Крамерса для средних по волновой функции атома водорода находим

$$\left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle = \frac{1}{l(l+1)} \frac{1}{a} \left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle,$$

откуда

$$\left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle = \frac{1}{a^3} \frac{2}{n^3(2l+1)l(l+1)},$$

а значит,

$$\delta_{sl}E = \left\langle \frac{e^2\hbar^2}{2m^2c^2} \frac{1}{r^3} (\mathbf{s} \cdot \mathbf{l}) \right\rangle = \frac{mc^2}{2n^2} \alpha_{\text{em}}^4 \frac{j(j+1) - l(l+1) - 3/4}{n(2l+1)l(l+1)} (1 - \delta_{l0}), \quad (7.27)$$

где последний фактор обращается в нуль при $l = 0$ и равен единице при $l \neq 0$.

Наконец, контактный вклад

$$\left\langle \frac{e^2\hbar^2}{2m^2c^2} \pi \delta(\mathbf{r}) \right\rangle = \frac{e^2\hbar^2}{2m^2c^2} \pi |\Psi(0)|^2,$$

пропорционален квадрату волновой функции в нуле, а значит, отличен от нуля только при $l = 0$. Нормированные волновые функции имеют

$$|\Psi(0)|^2 = \frac{1}{\pi a^3 n^3}, \quad (7.28)$$

так что контактный член равен

$$\delta_{\text{Darwin}}E = \frac{mc^2}{2n^2} \alpha_{\text{em}}^4 \frac{1}{n} \delta_{l0}. \quad (7.29)$$

Суммируем полученные результаты сначала для $l_- = j - 1/2 \neq 0$. Тогда в силу $2l_- + 1 = 2j$ и $l_-(l_- + 1) = j^2 - 1/4$ легко находим

$$\delta_{\text{kin}}E + \delta_{sl}E = -\frac{mc^2}{2n^2} \alpha_{\text{em}}^4 \frac{1}{n} \left\{ \frac{n}{j} - \frac{3n}{4} - \frac{j-1/2}{j^2-1/4} \frac{n}{2j} \right\} = -\frac{mc^2}{2n^2} \alpha_{\text{em}}^4 \frac{1}{n^2} \left\{ \frac{n}{j+1/2} - \frac{3}{4} \right\}.$$

Аналогично при $l_+ = j + 1/2$ в силу $2l_+ + 1 = 2(j+1)$ и $j(j+1) = l_+^2 - 1/4$ получим

$$\delta_{\text{kin}}E + \delta_{sl}E = -\frac{mc^2}{2n^2} \alpha_{\text{em}}^4 \frac{1}{n} \left\{ \frac{n}{j+1} - \frac{3n}{4} + \frac{l_++1}{2l_+(l_++1)} \frac{n}{j+1} \right\} = -\frac{mc^2}{2n^2} \alpha_{\text{em}}^4 \frac{1}{n^2} \left\{ \frac{n}{j+1/2} - \frac{3}{4} \right\},$$

т.е. мы получаем одно и то же выражение при $l_{\pm} = j \pm 1/2 \neq 0$. Не составляет труда убедиться в том, что и при $l = 0$ остается справедлива формула для ведущей релятивистской поправки к спектру в атоме водорода

$$\delta E = -\frac{mc^2}{2n^2} \alpha_{\text{em}}^4 \frac{1}{n^2} \left\{ \frac{n}{j+1/2} - \frac{3}{4} \right\}, \quad (7.30)$$

что, конечно, воспроизводит результат, полученный при разложении по $\alpha_{\text{em}} \rightarrow 0$ выражения для энергии связи в атоме водорода из релятивистского уравнения Дирака со статическим кулоновским потенциалом.

Тонкое расщепление уровней с заданным значением главного квантового числа n в зависимости от j схематически показано на рис. 4.1. Напомним, что сохраняется двукратное вырождение состояний nl_j по орбитальному моменту $l = j \pm 1/2$, так как энергия зависит только от главного квантового числа и полного момента электрона j .

Итак, мы установили динамическую природу релятивистских поправок к спектру связанных состояний в атоме водорода. Учет спина электрона позволил достигнуть согласия с

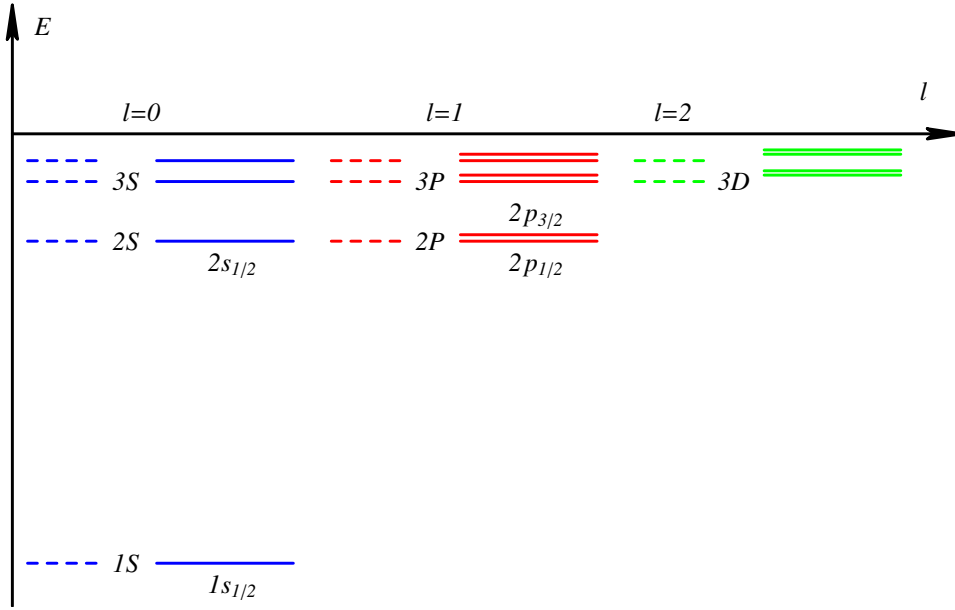


Рис. 4.1: Уровни связанных состояний электрона в атоме водорода в нерелятивистском приближении (штриховые линии) и с учетом расщепления из-за релятивистских поправок (сплошные линии).

экспериментальным исследованием спектров переходов между уровнями с точностью, соответствующей сделанным теоретическим расчетам $\mathcal{O}(\alpha_{\text{em}}^4)$. Как уже упоминалось выше, поправки высших порядков включают в себя сверхтонкое расщепление за счет взаимодействия спина электрона со спином ядра и лэмбовский сдвиг s -волновых уровней за счет флуктуаций электромагнитного поля. Еще один источник поправок порядка $\mathcal{O}(\alpha_{\text{em}}^5)$ — аномальный магнитный момент электрона: отличие фактора Ланде от 2.

7.4. Аномальный магнитный момент

Как мы видели, значение фактора Ланде $g = 2$ есть прямое следствие калибровочной инвариантности взаимодействия с безмассовым векторным полем и *рецепта минимальной связи* заряда с полем: длинная ковариантная производная или обобщенный импульс. Однако при наличии спина существует также возможность введения калибровочных взаимодействий посредством связи инвариантного тензора напряженности F_{kn} с тензором спина $\hat{\sigma}^{kn}$, так как каждый из них антисимметричен. Дополнительный вклад в действие для спинора Дирака запишем в виде

$$S_{\text{anomal}} = - \int d^4x a \frac{e\hbar}{4mc^2} F_{kn} \bar{\psi} \hat{\sigma}^{kn} \psi. \quad (7.31)$$

Матрицы $\hat{\sigma}^{kn}$ в представлении Дирака имеют вид

$$\hat{\sigma}^{0\alpha} = i\gamma_5 \sigma^\alpha = i \begin{pmatrix} 0 & \sigma^\alpha \\ \sigma^\alpha & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}^{\alpha\beta} = \epsilon_{\alpha\beta\gamma} \sigma^\gamma = \epsilon_{\alpha\beta\gamma} \begin{pmatrix} \sigma^\gamma & 0 \\ 0 & \sigma^\gamma \end{pmatrix}.$$

В нерелятивистском приближении $\mathbf{p} \rightarrow 0$ биспинор Дирака сводится к нерелятивистскому спинору $\psi \approx (\varphi, 0)$. Поэтому в аномальном взаимодействии (7.31) ненулевой вклад дает

только диагональный член с $\hat{\sigma}^{\alpha\beta}$

$$S_{\text{anomal}} \approx - \int d^4x a \frac{e\hbar}{4mc^2} F_{\alpha\beta} \epsilon_{\alpha\beta\gamma} \varphi^\dagger \sigma^\gamma \varphi,$$

так что стандартная связь компонент тензора напряженности с магнитным полем $F_{\alpha\beta} \epsilon_{\alpha\beta\gamma} = -2\mathcal{H}^\gamma$ приводит к

$$S_{\text{anomal}} \approx + \int dt \int d^3\mathbf{r} \varphi^\dagger (\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\mathcal{H}}) a \frac{e\hbar}{2mc}, \quad (7.32)$$

т.е. к аномальному магнитному моменту частицы со спином 1/2:

$$\boldsymbol{\mu} = (1 + a) \frac{e\hbar}{mc} (\mathbf{s} \cdot \boldsymbol{\mathcal{H}}). \quad (7.33)$$

Таким образом, вообще говоря, магнитный момент за счет аномального вклада мог бы принимать произвольные значения. Однако, в квантовой теории поля, учитывающей петлевые поправки в теории возмущений, прямое включение члена с аномальным магнитным моментом недопустимо, так как он приводит к так называемым неперенормируемым поправкам: петлевые поправки могут принимать конечные значения только при введении бесконечно счетного числа новых членов взаимодействий с соответствующими новыми константами. Чтобы избежать подобного логического тупика, сводящего предсказательную силу теории к нулю, необходимо положить исходный или, как говорят, затравочный аномальный магнитный момент равным нулю. Тогда учет петлевых поправок становится однозначным (теория перенормируема), и эти поправки в теории возмущений приводят к малому по константе взаимодействия α_{em} аномальному магнитному моменту частицы со спином 1/2, так что согласно Швингеру

$$a = \frac{\alpha_{\text{em}}}{2\pi}, \quad (7.34)$$

что согласуется с экспериментом.

Поскольку отклонения аномального магнитного момента от расчетного свидетельствовало бы о наличии неизвестного типа взаимодействий, измерения аномального магнитного момента с высочайшей точностью находятся на переднем фронте современных экспериментальных исследований: точность для мюона достигла двенадцати порядков значащих цифр. В настоящее время данные согласуются с расчетами на основе калибровочных теорий электромагнитных, слабых и сильных взаимодействий.

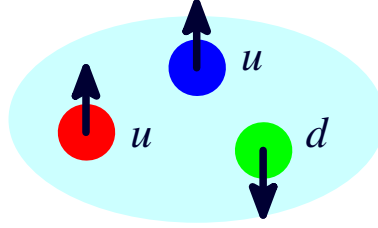
Задача 3. Вычислить магнитные моменты барионов в составной модели «конституентных» u , d и s кварков: протона $p = (uud)$, нейтрона $n = (ddu)$ и заряженных сигма-гиперонов $\Sigma^+ = (uus)$, $\Sigma^- = (dds)$. Считать, что барионы являются антисимметричными состояниями кварков трех цветов: квантовое число $\alpha = \{1, 2, 3\} \equiv \{\text{синий, красный, желтый}\}$, так что, например, цветовое состояние протона $|\text{color}\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}} \epsilon_{\alpha\beta\gamma} u^\alpha u^\beta d^\gamma$. Заряды кварков положить равными $Q_u = 2/3$, $Q_d = Q_s = -1/3$ в единицах заряда протона e , в то время как массам кварков сопоставить реалистические значения $m_u = m_d = 330$ МэВ, $m_s = 480$ МэВ. Массу нуклона считать равной $m_N = 940$ МэВ. Выразить результат в единицах ядерного магнетона $\mu_N = \frac{e\hbar}{2m_N c}$. Сравнить с экспериментальными данными: $\mu_p = 2.79 \mu_N$, $\mu_n = -1.91 \mu_N$, $\mu_{\Sigma^+} = 2.46 \mu_N$, $\mu_{\Sigma^-} = -1.16 \mu_N$. Какой вывод можно сделать о значениях g -факторов конституентных кварков в барионах?

Решение. Барионы, рассматриваемые в задаче, являются основными состояниями для каждой из заданных кварковых систем, т.е. кварки находятся в s -волновых конфигурациях с нулевым орбитальным моментом. Более того, модель конституентных кварков предполагает, что движением кварков в барионах можно пренебречь: кварки покоятся в системе покоя бариона, так что энергия связи

мала, и масса бариона приближенно дается суммой масс конstituентных кварков, $M_B \approx \sum_q m_q$. Поэтому в задаче о магнитных моментах пространственная часть волновой функции кварков не существенна (она симметрична по перестановкам тождественных кварков), и вектор состояния бариона по сути сводится к произведению состояний, факторизованных по цвету и спину:

$$|\text{baryon}\rangle = |\text{color}\rangle |\text{spin}\rangle.$$

Цветовое состояние определено условием задачи. Оно является нормированным на единицу. Важно, что это состояние является антисимметричным по перестановке кварков, так как в каждом из рассматриваемых барионов есть по паре *тождественных* кварков, которые являются фермионами.



Состояние тождественных фермионов, согласно принципу Паули, должно быть антисимметрично по перестановке частиц. Отсюда с учетом антисимметрии цветовой части состояния следует, что спиновая часть волновой функции должна быть симметричной относительно перестановки тождественных кварков. Поэтому спиновое состояние, скажем, пары *u*-кварков имеет спин $S = 1$, т.е. является векторным, а состояние с нулевым спином, скалярное состояние, запрещено. Полный спин исследуемых барионов равен $1/2$. Его можно представить как сумму спина двух тождественных кварков и третьего кварка, т.е. как результат сложения спина 1 и спина $1/2$. Например, для состояния протона $|j, m\rangle$

$$|1/2, +1/2\rangle_p = \sqrt{\frac{2}{3}} |1, +1\rangle |-\rangle_d - \sqrt{\frac{1}{3}} |1, 0\rangle |+\rangle_d,$$

где $|\pm\rangle_d$ — спиновое состояние *d*-кварка, а спиновые состояния пары *u*-кварков задаются стандартным образом:

$$\begin{aligned} |1, +1\rangle &= |+\rangle_{u_1} |+\rangle_{u_2}, \\ |1, 0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|+\rangle_{u_1} |-\rangle_{u_2} + |-\rangle_{u_1} |+\rangle_{u_2} \right). \end{aligned}$$

Найдем магнитный момент бариона как среднее значение суммы проекций магнитных моментов кварков на ось z в заданном нами состоянии:

$$\mu_B = \left\langle \sum_q g_q \frac{e\hbar}{2m_q c} Q_q s_z^q \right\rangle = \frac{e\hbar}{2m_N c} \left\langle \sum_q \frac{m_N}{m_q} Q_q g_q s_z^q \right\rangle = \mu_N \left\langle \sum_q \frac{m_N}{m_q} Q_q g_q s_z^q \right\rangle,$$

где $g \approx 2$ для дираковской частицы. Для протона, очевидно, действие операторов спина кварков с соответствующими факторами дает

$$\begin{aligned} \sum_{q=u_1, u_2} \frac{m_N}{m_u} Q_u g_u s_z^q |1, +1\rangle &= g_u \frac{m_N}{m_u} Q_u |1, +1\rangle, \\ \sum_{q=u_1, u_2} \frac{m_N}{m_u} Q_u g_u s_z^q |1, 0\rangle &= 0, \\ \frac{m_N}{m_d} Q_d g_d s_z^d |\pm\rangle &= \pm \frac{g_d}{2} \frac{m_N}{m_d} Q_d |\pm\rangle. \end{aligned}$$

В итоге, магнитный момент протона равен

$$\mu_p = \mu_N \left\{ \frac{2}{3} \left(g_u \frac{m_N}{m_u} Q_u - g_d \frac{m_N}{2m_d} Q_d \right) + \frac{1}{3} g_d \frac{m_N}{2m_d} Q_d \right\} = \mu_N \left\{ g_u \frac{4}{9} \frac{m_N}{m_u} + g_d \frac{1}{18} \frac{m_N}{m_d} \right\}.$$

Совершенно аналогично для нейтрона $n = (ddu)$

$$\mu_n = \mu_N \left\{ g_d \frac{2}{3} \frac{m_N}{m_d} Q_d - g_u \frac{1}{6} \frac{m_N}{m_u} Q_u \right\} = \mu_N \left\{ -g_d \frac{2}{9} \frac{m_N}{m_d} - g_u \frac{1}{9} \frac{m_N}{m_u} \right\},$$

для гиперона $\Sigma^+ = (uus)$

$$\mu_{\Sigma^+} = \mu_N \left\{ g_u \frac{2}{3} \frac{m_N}{m_u} Q_u - g_s \frac{1}{6} \frac{m_N}{m_s} Q_s \right\} = \mu_N \left\{ g_u \frac{4}{9} \frac{m_N}{m_u} + g_s \frac{1}{18} \frac{m_N}{m_s} \right\},$$

для гиперона $\Sigma^- = (dds)$

$$\mu_{\Sigma^-} = \mu_N \left\{ g_d \frac{2}{3} \frac{m_N}{m_d} Q_d - g_s \frac{1}{6} \frac{m_N}{m_s} Q_s \right\} = \mu_N \left\{ -g_d \frac{2}{9} \frac{m_N}{m_d} + g_s \frac{1}{18} \frac{m_N}{m_s} \right\}.$$

В ведущем приближении положим g -факторы для всех кварков равными 2. Тогда в сравнении с экспериментом получим

$$\text{leading order: } \mu_p = 2.85 \mu_N, \quad \mu_n = -1.90 \mu_N, \quad \mu_{\Sigma^+} = 2.75 \mu_N, \quad \mu_{\Sigma^-} = -1.05 \mu_N;$$

$$\text{experiment: } \mu_p = 2.79 \mu_N, \quad \mu_n = -1.91 \mu_N, \quad \mu_{\Sigma^+} = 2.46 \mu_N, \quad \mu_{\Sigma^-} = -1.16 \mu_N.$$

Это сравнение указывает на то, что g -факторы близки к теоретическому значению, которое не учитывает квантовые эффекты. Оценим величину этих эффектов. Для этого составим следующие правила сумм, которые позволяют получить значения g -факторов из экспериментальных данных путем разрешения выражений для магнитных моментов как уравнений для g -факторов. В самом деле, например,

$$\frac{1}{\mu_N} (4\mu_p + \mu_n) = \frac{5}{3} g_u \frac{m_N}{m_u}.$$

Отсюда получаем, что с экспериментом согласуется значение

$$g_u \approx 1.97.$$

Аналогично, для d -кварка находим

$$\frac{1}{\mu_N} (\mu_p + 4\mu_n) = -\frac{5}{6} g_d \frac{m_N}{m_d} \Rightarrow g_d \approx 2.04.$$

Однако, эти поправки лишь слегка уменьшают разногласие в значениях магнитных моментов для гиперонов. Конечно, согласие применяемой модели с экспериментом можно улучшить, учитывая, например, энергию связи кварков: эффективные массы кварков будут несколько больше для более тяжелых по сравнению с нуклонами гиперонов, и вводя другие поправки. Тем не менее, можно считать, что упрощенная картина представления сложных барионных систем в виде трех покоящихся конstituентных кварков дает правильные качественные результаты с точностью лучше 10% для магнитных моментов с g -факторами кварков, близкими к 2. ■

Тема 5

Атом гелия

Лекция № 8

Потенциал в атоме гелия и сохранение суммарного орбитального момента, статистика Ферми для электронов с учетом спина: орто- и пара-гелий, потенциал ведущего приближения, обменное взаимодействие и отталкивание электронов, теорема об отрицательной разности энергии связи триплета и синглета, приближение факторизации и уравнения Хартри, обобщение с учетом обменного члена – метод Хартри–Фока, самосогласованное поле – сферически симметричный потенциал ядра и его экранировка электронами, сведение задачи к одноэлектронной: конфигурация электронов, диагональность поправки по полному орбитальному моменту и обменный вклад: термы, расчет основного состояния атома гелия в модели с эффективным, экранированным зарядом ядра, интегралы, точность метода и относительная величина поправок, задача о поправке второго порядка по возмущению, роль экранировки ядра, величина релятивистских поправок и электронные термы.

Для того чтобы продемонстрировать трудности, возникающие при описании многоэлектронных атомов и молекул, которые составляют предмет науки квантовой химии, рассмотрим простейшую систему — атом гелия, считая неподвижным его ядро с зарядом 2, взаимодействующее с двумя электронами.

8.1. Нерелятивистская задача

Опуская релятивистские поправки к движению электронов, запишем гамильтониан электронов в атоме гелия: сумма кинетических энергий электронов с потенциальными энергиями притяжения к ядру и отталкивания между электронами,

$$\hat{H}_{\text{NR}} = \frac{\mathbf{p}_A^2}{2m} + \frac{\mathbf{p}_B^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r_A} - \frac{Ze^2}{r_B} + \frac{e^2}{|\mathbf{r}_A - \mathbf{r}_B|}, \quad Z = 2, \quad (8.1)$$

координаты и операторы импульсов помечены индексами A и B , относящимися к двум электронам.

Коммутаторы орбитальных моментов электронов с гамильтонианом легко вычисляются:

$$\begin{aligned} [l_A^\alpha, \hat{H}_{\text{NR}}] &= -i\epsilon_{\alpha\beta\gamma}r_A^\beta \left[\partial_A^\gamma, \frac{e^2}{|\mathbf{r}_A - \mathbf{r}_B|} \right] = -i \frac{e^2}{|\mathbf{r}_A - \mathbf{r}_B|^3} (\mathbf{r}_A \times \mathbf{r}_B)^\alpha, \\ [l_B^\alpha, \hat{H}_{\text{NR}}] &= -i\epsilon_{\alpha\beta\gamma}r_B^\beta \left[\partial_B^\gamma, \frac{e^2}{|\mathbf{r}_A - \mathbf{r}_B|} \right] = -i \frac{e^2}{|\mathbf{r}_A - \mathbf{r}_B|^3} (\mathbf{r}_B \times \mathbf{r}_A)^\alpha, \end{aligned}$$

откуда сразу следует, что сохраняется суммарный орбитальный момент

$$[l_A^\alpha + l_B^\alpha, \hat{H}_{\text{NR}}] = 0. \quad (8.2)$$

Поэтому в принятом приближении связанные состояния электронов в атоме гелия характеризуются значением энергии, полного орбитального момента l и его проекцией m .

К ним можно добавить еще значения проекций спина каждого из электронов. Однако такая схема, вполне приемлемая для частиц разного сорта, очевидно нуждается в корректировке, так как электроны являются тождественными частицами. Поэтому состояния электронов, подчиняющихся статистике Ферми, должны быть антисимметричными по перестановке частиц.

Спиновые состояния двух электронов с суммарным спином $S = 0$ и $S = 1$ согласно правилам сложения двух моментов имеют вид:

$$S = 1: \quad |1, +1\rangle = |+\rangle_A |+\rangle_B, \quad |1, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ |+\rangle_A |-\rangle_B + |-\rangle_A |+\rangle_B \}, \quad |1, -1\rangle = |-\rangle_A |-\rangle_B,$$

$$S = 0: \quad |0, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ |+\rangle_A |-\rangle_B - |-\rangle_A |+\rangle_B \},$$

а значит, они являются симметричными по перестановкам при $S = 1$ и антисимметричными при $S = 0$. Это обстоятельство упрощает поиск волновых функций стационарных состояний, потому что сам гамильтониан (8.1) является симметричным по перестановкам электронов¹. С учетом того, что операторы спина коммутируют с орбитальным моментом, всегда имеется возможность соответствующей суперпозицией выбрать волновые функции так, чтобы они обладали заданными значениями полного спина и полного орбитального момента и симметрией пространственных частей по перестановкам электронов: если волновая функция $\psi(\mathbf{r}_A, \mathbf{r}_B)$ удовлетворяет стационарному уравнению Шредингера с гамильтонианом (8.1), то и волновая функция $\psi(\mathbf{r}_B, \mathbf{r}_A)$ также удовлетворяет этому уравнению, что позволяет оперировать функциями симметричными по перестановкам:

$$\psi_0(\mathbf{r}_A, \mathbf{r}_B) = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ \psi(\mathbf{r}_A, \mathbf{r}_B) + \psi(\mathbf{r}_B, \mathbf{r}_A) \}$$

для состояний с полным спином $S = 0$, и

$$\psi_1(\mathbf{r}_A, \mathbf{r}_B) = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ \psi(\mathbf{r}_A, \mathbf{r}_B) - \psi(\mathbf{r}_B, \mathbf{r}_A) \}$$

для состояний с полным спином $S = 1$. Тогда полные волновые функции

$$\psi_0(\mathbf{r}_A, \mathbf{r}_B) |0, 0\rangle, \quad \psi_1(\mathbf{r}_A, \mathbf{r}_B) |1, m_s\rangle$$

обладают антисимметрией по отношению к перестановкам электронов.

Состояния с $S = 0$ называются уровнями *пара*-гелия, а с $S = 1$ — *орто*-гелия. Ортоголий в нерелятивистском приближении трижды вырожден по значениям проекции полного спина, поэтому его еще называют триплетным. Отметим, что в случае

$$\psi(\mathbf{r}_A, \mathbf{r}_B) = \psi(\mathbf{r}_B, \mathbf{r}_A)$$

необходимо, во-первых, подправить нормировку состояния парегелия ($1/\sqrt{2} \mapsto 1/2$), а во-вторых, установить запрет на состояния ортогогелия, так как его волновая функция тождественно обращается в нуль.

¹В силу тождественности электронов гамильтонианы, не симметричные по перестановкам, запрещены: иначе имелась бы возможность отличить один электрон от другого.

Задачу нахождения волновых функций стационарных состояний решают методом теории возмущений, полагая, что в ведущем приближении имеет место факторизация волновых функций электронов:

$$\psi(\mathbf{r}_A, \mathbf{r}_B) \approx \psi_A(\mathbf{r}_A) \psi_B(\mathbf{r}_B). \quad (8.3)$$

Здесь функции $\psi_{A,B}$ являются собственными состояниями специально выбранных гамильтонианов ведущего приближения, записанных в атомных единицах²

$$H_A = -\frac{1}{2} \Delta_A + V(r_A), \quad H_B = -\frac{1}{2} \Delta_B + V(r_B),$$

так что

$$H_A \psi_A = E_A \psi_A, \quad H_B \psi_B = E_B \psi_B,$$

причем гамильтониан в атоме гелия в атомных единицах

$$\hat{H}_{\text{He}} = -\frac{1}{2} \Delta_A - \frac{1}{2} \Delta_B - \frac{Z}{r_A} - \frac{Z}{r_B} + \frac{1}{|\mathbf{r}_A - \mathbf{r}_B|},$$

естественно, после тождественного преобразования представим в виде

$$\hat{H}_{\text{He}} = H_A + H_B + \bar{V}(\mathbf{r}_A, \mathbf{r}_B),$$

где

$$\bar{V}(\mathbf{r}_A, \mathbf{r}_B) = -\frac{Z}{r_A} - \frac{Z}{r_B} + \frac{1}{|\mathbf{r}_A - \mathbf{r}_B|} - V(r_A) - V(r_B),$$

причем возмущение обладает свойством инвариантности относительно перестановок координат электронов $\mathbf{r}_A \leftrightarrow \mathbf{r}_B$

$$\bar{V}(\mathbf{r}_A, \mathbf{r}_B) = \bar{V}(\mathbf{r}_B, \mathbf{r}_A).$$

Вопросы о методах построения потенциалов ведущего приближения³ мы опишем ниже: важно, чтобы поправка за счет возмущения была мала, — но прежде остановимся на общих свойствах такого подхода к задаче в целом.

8.2. Обменное взаимодействие

Пусть волновые функции электронов в ведущем приближении различны

$$\psi_A(\mathbf{r}) \neq \psi_B(\mathbf{r}),$$

т.е. электроны находятся в различных стационарных состояниях гамильтониана H_A :

$$\int d^3\mathbf{r} \psi_A^*(\mathbf{r}) \psi_B(\mathbf{r}) = 0.$$

Для краткости записи введем обозначения для произведения волновых функций

$$\psi_{AB} = \psi_A(\mathbf{r}_A) \psi_B(\mathbf{r}_B), \quad \psi_{BA} = \psi_B(\mathbf{r}_A) \psi_A(\mathbf{r}_B),$$

²Расстояния измеряются в единицах боровского радиуса $a = \hbar^2/(me^2)$, а энергия в удвоенных Ридбергах $E_0 = \hbar^2/(ma^2)$, так что уровни атома водорода в атомных единицах $E_n = -1/(2n^2)$.

³В простейшем, но не в лучшем случае можно, конечно, просто положить $V(r) = -Z/r$.

причем эти состояния ортогональны

$$\langle \psi_{AB} | \psi_{BA} \rangle = \int d^3 \mathbf{r}_A \psi_A^*(\mathbf{r}_A) \psi_B(\mathbf{r}_A) \int d^3 \mathbf{r}_B \psi_B^*(\mathbf{r}_B) \psi_A(\mathbf{r}_B) = 0.$$

Тогда состояниям с суммарным спином $S = 0$ и $S = 1$ отвечают нормированные пространственные волновые функции

$$\psi_{0,1} = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ \psi_{AB} \pm \psi_{BA} \}.$$

По построению

$$H_A \psi_{0,1} = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ E_A \psi_{AB} \pm E_B \psi_{BA} \}, \quad H_B \psi_{0,1} = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ E_B \psi_{AB} \pm E_A \psi_{BA} \},$$

так что

$$(H_A + H_B) \psi_{0,1} = (E_A + E_B) \psi_{0,1}.$$

Значит, в теории возмущений поправка к энергии дается матричными элементами

$$\langle \psi_0 | \bar{V} | \psi_0 \rangle = \langle \psi_{AB} | \bar{V} | \psi_{AB} \rangle + \langle \psi_{AB} | \bar{V} | \psi_{BA} \rangle,$$

$$\langle \psi_1 | \bar{V} | \psi_1 \rangle = \langle \psi_{AB} | \bar{V} | \psi_{AB} \rangle - \langle \psi_{AB} | \bar{V} | \psi_{BA} \rangle,$$

где мы учли симметричность возмущения по перестановкам координат электронов, откуда

$$\langle \psi_{AB} | \bar{V} | \psi_{AB} \rangle = \langle \psi_{BA} | \bar{V} | \psi_{BA} \rangle, \quad \langle \psi_{AB} | \bar{V} | \psi_{BA} \rangle = \langle \psi_{BA} | \bar{V} | \psi_{AB} \rangle.$$

В итоге, энергия связи пара- и орто-гелия дается выражением

$$E_{0,1} = E_A + E_B + \langle \psi_{AB} | \bar{V} | \psi_{AB} \rangle \pm \langle \psi_{AB} | \bar{V} | \psi_{BA} \rangle. \quad (8.4)$$

Член

$$V_{\text{perm.}} = \langle \psi_{AB} | \bar{V} | \psi_{BA} \rangle = \int d^3 \mathbf{r}_A d^3 \mathbf{r}_B \psi_A^*(\mathbf{r}_A) \psi_B^*(\mathbf{r}_B) \bar{V}(\mathbf{r}_A, \mathbf{r}_B) \psi_B(\mathbf{r}_A) \psi_A(\mathbf{r}_B) \quad (8.5)$$

возникает вследствие антисимметризации полной волновой функции тождественных фермионов–электронов посредством перестановок (permutations), и он называется вкладом обменного взаимодействия.

Введем «плотность»

$$\rho_{AB}(\mathbf{r}) = \psi_A(\mathbf{r}) \psi_B^*(\mathbf{r})$$

с нулевым зарядом

$$\int d^3 \mathbf{r} \rho_{AB}(\mathbf{r}) = 0.$$

Тогда в интеграле

$$\int d^3 \mathbf{r}_B \bar{V}(\mathbf{r}_A, \mathbf{r}_B) \rho_{AB}(\mathbf{r}_B)$$

выпадают вклады в \bar{V} , зависящие только от \mathbf{r}_A . Аналогично в интеграле

$$\int d^3 \mathbf{r}_A \bar{V}(\mathbf{r}_A, \mathbf{r}_B) \rho_{AB}^*(\mathbf{r}_A)$$

выпадают вклады в \bar{V} , зависящие только от \mathbf{r}_B . Значит, в обменном члене остается только вклад за счет взаимодействия электронов друг с другом

$$V_{\text{perm.}} = \int d^3\mathbf{r}_A d^3\mathbf{r}_B \frac{\rho_{AB}(\mathbf{r}_B)\rho_{AB}^*(\mathbf{r}_A)}{|\mathbf{r}_A - \mathbf{r}_B|}. \quad (8.6)$$

Теперь заметим, что

$$\phi(\mathbf{r}_A) = \int d^3\mathbf{r}_B \frac{\rho_{AB}(\mathbf{r}_B)}{|\mathbf{r}_A - \mathbf{r}_B|}$$

есть статический потенциал зарядов с плотностью $\rho_{AB}(\mathbf{r}_B)$. Для него имеет место уравнение Пуассона

$$-\Delta\phi = 4\pi \rho_{AB},$$

и поэтому

$$V_{\text{perm.}} = \int d^3\mathbf{r}_A \phi(\mathbf{r}_A) \rho_{AB}^*(\mathbf{r}_A) = -\frac{1}{4\pi} \int d^3\mathbf{r}_A \phi(\mathbf{r}_A) \Delta\phi^*(\mathbf{r}_A),$$

так что, проводя интегрирование по частям с нулевым поверхностным членом: потенциал обращается в нуль на бесконечности, потому что электроны находятся в связанном состоянии, — получаем

$$V_{\text{perm.}} = \frac{1}{4\pi} \int d^3\mathbf{r}_A \{\nabla\phi(\mathbf{r}_A)\} \nabla\phi^*(\mathbf{r}_A) = \frac{1}{4\pi} \int d^3\mathbf{r}_A |\nabla\phi(\mathbf{r}_A)|^2 > 0. \quad (8.7)$$

Строгое неравенство, естественно, следует из того факта, что потенциал создает не равное нулю электрическое поле.

В силу установленной положительности обменного вклада заключаем, что *состояние ортоголемия имеет меньшую энергию, чем состояние паратеглемия*.

8.3. Уравнения Хартри–Фока

Уравнение Шредингера для статических состояний получается вариацией «действия» за время T

$$S = T \int d^3\mathbf{r}_A d^3\mathbf{r}_B \psi^*(\mathbf{r}_A, \mathbf{r}_B) \{E - \hat{H}_{\text{He}}\} \psi(\mathbf{r}_A, \mathbf{r}_B)$$

по $\psi^*(\mathbf{r}_A, \mathbf{r}_B)$. Если принять в ведущем приближении факторизацию волновых функций электронов $\psi(\mathbf{r}_A, \mathbf{r}_B) \approx \psi_A(\mathbf{r}_A) \psi_B(\mathbf{r}_B)$, то вариация

$$\begin{aligned} \frac{S}{T} &\approx \int d^3\mathbf{r}_A d^3\mathbf{r}_B \psi_A^*(\mathbf{r}_A) \psi_B^*(\mathbf{r}_B) \{E_A + E_B - \hat{H}_{\text{He}}\} \psi_A(\mathbf{r}_A) \psi_B(\mathbf{r}_B) \\ &= \int d^3\mathbf{r}_A \psi_A^*(\mathbf{r}_A) \left(E_A - \left\{ -\frac{1}{2}\Delta_A - \frac{Z}{r_A} \right\} \right) \psi_A(\mathbf{r}_A) \\ &\quad + \int d^3\mathbf{r}_B \psi_B^*(\mathbf{r}_B) \left(E_B - \left\{ -\frac{1}{2}\Delta_B - \frac{Z}{r_B} \right\} \right) \psi_B(\mathbf{r}_B) \\ &\quad - \int d^3\mathbf{r}_A d^3\mathbf{r}_B \psi_A^*(\mathbf{r}_A) \psi_B^*(\mathbf{r}_B) \frac{1}{|\mathbf{r}_A - \mathbf{r}_B|} \psi_A(\mathbf{r}_A) \psi_B(\mathbf{r}_B) + \text{const.} \end{aligned}$$

по ψ_A^* и ψ_B^* дает систему связанных уравнений

$$\begin{cases} E_A \psi_A = \left\{ -\frac{1}{2}\Delta_A - \frac{Z}{r_A} + \phi_B(\mathbf{r}_A) \right\} \psi_A, \\ E_B \psi_B = \left\{ -\frac{1}{2}\Delta_B - \frac{Z}{r_B} + \phi_A(\mathbf{r}_B) \right\} \psi_B, \end{cases} \quad (8.8)$$

где в гамильтониан для электрона входит потенциал его взаимодействия с распределенным зарядом другого электрона

$$\phi_B(\mathbf{r}_A) = \int d^3\mathbf{r}_B \frac{\rho_B(\mathbf{r}_B)}{|\mathbf{r}_A - \mathbf{r}_B|}, \quad \phi_A(\mathbf{r}_B) = \int d^3\mathbf{r}_A \frac{\rho_A(\mathbf{r}_A)}{|\mathbf{r}_A - \mathbf{r}_B|},$$

где в атомных единицах плотность зарядов

$$\rho_A(\mathbf{r}_A) = |\psi_A(\mathbf{r}_A)|^2, \quad \rho_B(\mathbf{r}_A) = |\psi_B(\mathbf{r}_B)|^2.$$

Записанная система уравнений носит имя Хартри. Ее физический смысл достаточно прозрачен: энергия электрона определяется суммой его кинетической энергии, потенциала притяжения к ядру, которое экранируется “облаком” другого электрона. Для наглядности такой трактовки мы ввели два параметра E_A и E_B , которые в действительности не являются независимыми, как это следует из вариации исходного действия, так что

$$E_A = E - \langle H^{(0)} \rangle_B,$$

$$E_B = E - \langle H^{(0)} \rangle_A,$$

где

$$H^{(0)} = -\frac{1}{2}\Delta - \frac{Z}{r}$$

это гамильтониан для электрона, взаимодействующего с ядром. В выражение входит среднее значение по волновой функции электрона, как это отмечено соответствующим индексом A или B , например, $\langle H^{(0)} \rangle_A = \langle \psi_A | H^{(0)} | \psi_A \rangle$. Тем не менее, величины $E_{A,B}$ имеют определенный физический смысл: они дают энергии ионизации электрона с соответствующими квантовыми числами.

Однако, решать подобную систему приходится численными методами. Подчеркнем, что в уравнениях Хартри никак не отражено свойство тождественности электронов. Конечно, учет статистики Ферми для электронов может быть затем достигнут путем соответствующей симметризации пространственных волновых функций в зависимости от значения суммарного спина электронов. Еще одна трудность — уравнения для электронов, находящихся в разных состояниях, отличаются за счет потенциала экранировки, $\phi_A(r) \neq \phi_B(r)$, и поэтому собственные функции для двух разных уравнений с различными квантовыми числами, вообще говоря, не ортогональны.

Обобщением уравнений Хартри являются уравнения Хартри–Фока, в которых напрямую учитываются правильные свойства пространственных волновых функций по отношению к перестановке тождественных электронов. Для вывода этих уравнений, очевидно, необходимо провести в действии подстановку волновой функции в *факторизованном* виде⁴

⁴Как при рассмотрении обменного вклада во взаимодействие, введем произведения $\psi_{AB} = \psi_A(\mathbf{r}_A)\psi_B(\mathbf{r}_B)$ и $\psi_{BA} = \psi_B(\mathbf{r}_A)\psi_A(\mathbf{r}_B)$.

$\psi(\mathbf{r}_A, \mathbf{r}_B) \approx \psi_0(\mathbf{r}_A, \mathbf{r}_B) = \{\psi_{AB} - \psi_{BA}\}/\sqrt{2}$ или $\psi(\mathbf{r}_A, \mathbf{r}_B) \approx \psi_1(\mathbf{r}_A, \mathbf{r}_B) = \{\psi_{AB} + \psi_{BA}\}/\sqrt{2}$ в зависимости от полного спина электронов. Тогда в действии появится вклад обменного взаимодействия

$$\frac{S_{\text{perm.}}}{T} = \mp \int d^3\mathbf{r}_A d^3\mathbf{r}_B \frac{\rho_{AB}(\mathbf{r}_A)\rho_{AB}^*(\mathbf{r}_B)}{|\mathbf{r}_A - \mathbf{r}_B|}, \quad \rho_{AB}(\mathbf{r}) = \psi_A(\mathbf{r})\psi_B^*(\mathbf{r}),$$

а также, возможно, недиагональные члены из-за неортогональности функций ψ_A и ψ_B

$$\mp \int d^3\mathbf{r}_A d^3\mathbf{r}_B \psi_{AB}^* \{E - H_A^{(0)} - H_B^{(0)}\} \psi_{BA},$$

куда входит интегральный «заряд»

$$Q_{AB} = \int d^3\mathbf{r} \rho_{AB}(\mathbf{r}).$$

Вариация действия по ψ_A^* и ψ_B^* с учетом обменного вклада приводит к системе уравнений в приближении Хартри–Фока

$$\begin{cases} E_A \psi_A = \left\{ -\frac{1}{2}\Delta_A - \frac{Z}{r_A} + \phi_B(\mathbf{r}_A) \right\} \psi_A \pm \{ \phi(\mathbf{r}_A) + \Delta E_A \} \psi_B(\mathbf{r}_A), \\ E_B \psi_B = \left\{ -\frac{1}{2}\Delta_B - \frac{Z}{r_B} + \phi_A(\mathbf{r}_B) \right\} \psi_B \pm \{ \phi^*(\mathbf{r}_B) + \Delta E_B \} \psi_A(\mathbf{r}_B), \end{cases} \quad (8.9)$$

где комплекснозначный «потенциал» обменного взаимодействия имеет прежний вид

$$\phi(\mathbf{r}_A) = \int d^3\mathbf{r}_B \frac{\rho_{AB}(\mathbf{r}_B)}{|\mathbf{r}_A - \mathbf{r}_B|},$$

а «сдвиги энергий» возникают из-за недиагональных вкладов

$$\Delta E_A = \langle \psi_B | H^{(0)} | \psi_A \rangle - E Q_{AB}, \quad \Delta E_B = \langle \psi_A | H^{(0)} | \psi_B \rangle - E Q_{BA}^*.$$

Взяв матричные элементы уравнений (8.9) по ψ_A и ψ_B соответственно, легко убедиться, что энергии ионизации принимают вещественные значения, несмотря на то, что в эти уравнения входят комплексные параметры.

Полагают, что решение уравнений Хартри–Фока дает ортогональные волновые функции для электронов с разными квантовыми числами. Тогда вклады с $Q_{AB} = 0$ выпадают, и связь энергий ионизации с энергией связи атома сохраняет прежний вид.

Важно подчеркнуть, что потенциалы экранировки ядра и обменного взаимодействия не произвольны, а определяются распределениями электронов, которые сами получаются из уравнений, т.е. эти потенциалы задаются *самосогласованным образом* и зависят от состояния электронов.

Как видим, полученная система уравнений для пространственных волновых функций *двух* электронов в приближении Хартри–Фока может учитывать отличие этих волновых функций для пара- и орто-гелия, но она невероятно сложна с точки зрения проблемы ее решения, что опять возвращает нас к методам теории возмущений, один из которых мы приведем ниже.

8.4. Самосогласованное поле: конфигурация электронов, термы

Будем считать, что каждый из электронов движется в сферически симметричном поле $V(r)$, которое учитывает как потенциал притяжения ядра, так и отталкивание от коллективного, распределенного заряда других электронов в атоме. Поскольку это распределение заранее неизвестно и, вообще говоря, зависит от состояния электронов, приходится моделировать этот потенциал некоторой функцией, что дает модель самосогласованного поля. Конечно, как мы видели, модель можно считать удачной, если поправки по теории возмущений за счет отличия потенциала в гамильтониане от самосогласованного поля оказываются малыми: по сути мы рассмотрели схему самосогласованного поля с начала постановки задачи для нерелятивистских волновых функций в атоме гелия. Указанием на вид самосогласованного поля могут служить итерации в решении уравнений Хартри–Фока, которые дают некие приближения для распределения зарядов электронов в атоме. У самосогласованного поля есть разумные асимптотики в нуле и на бесконечности: вблизи нуля определяющим является потенциал ядра, а на бесконечности электрон движется в поле притяжения единичного заряда, так как другие электроны экранируют ядро.

Однако методически оказывается более важным другой факт: в едином для каждого из электронов центрально симметричном поле, приближенно учитывающем коллективную плотность заряда, легко провести классификацию уровней и квантовых чисел электрона, так как она фактически повторяет классификацию одноэлектронной системы в атоме водорода с той лишь разницей, что решение радиального уравнения с потенциалом самосогласованного поля необходимо проводить численно.

Итак, каждому электрону ставится в соответствие главное квантовое число n , орбитальный момент l и его проекция m . Но согласно принципу запрета Паули для каждого значения проекции орбитального момента допустимы лишь два состояния электрона с противоположной ориентацией спина. Поэтому для каждого значения l , т.е. для электронной оболочки, возможное число заполнения уровня не превышает $2(2l + 1)$. Электроны, заполняющие одну и ту же оболочку, называются *эквивалентными*. Набор квантовых чисел nl с указанием степени заполнения оболочки составляет *конфигурацию* электронов в ведущем приближении самосогласованного поля.

Например, в атоме гелия основное состояние отвечает конфигурации $1s^2$, а первые возбужденные состояния — $1s2p$ и $1s2s$.

Так как возмущение, учитывающее отличие центрально симметричного потенциала и вклада отталкивания электронов от самосогласованного поля, в атоме является диагональным в базисе с заданным значением суммарного орбитального момента электронов, то правильные функции ведущего приближения — состояния с определенным значением орбитального момента и коммутирующего с ним полного спина электронов:

$$|\text{config.}\rangle|\text{spin}\rangle \mapsto |\text{config.}; L, m_L; S, m_S\rangle \mapsto \begin{cases} |\text{config.}; L, m_L; \text{ortho}\rangle, \\ |\text{config.}; L, m_L; \text{para}\rangle, \end{cases}$$

где еще необходимо учесть принцип запрета Паули — антисимметризовать состояние по перестановкам электронов.

Итак, состояния с различными значениями полного орбитального момента диагонализуют гамильтониан атома гелия, имея, вообще говоря различные значения поправок к энергии. Значит, состояния необходимо характеризовать квантовым числом L . Мы видели также, что обменный вклад приводит к меньшему значению энергии для ортогелия, чем для

парагелия. Отсюда следует, что для полной характеристики уровня в атоме необходимо указать наряду с конфигурацией пару квантовых чисел: полный орбитальный момент L и суммарный спин S . Эта пара, как говорят, определяет *терм*, который принято записывать в виде ^{2S+1}L , где, как обычно, для момента L вместо чисел используются буквенные обозначения, но в отличие от конфигурации, где пишут строчные буквы, здесь употребляют заглавные. Например, упомянутым выше конфигурациям соответствуют следующие термы:

$$1s^2 \mapsto {}^1S, \quad 1s2p \mapsto {}^1P, {}^3P.$$

8.5. Основное состояние

Для иллюстрации метода самосогласованного поля на примере атома гелия введем простейший центрально симметричный потенциал кулоновского вида

$$V(r) = -\frac{\bar{Z}}{r},$$

где \bar{Z} — некий эффективный заряд, который позволяет промоделировать поле ядра и его экранировку на масштабах порядка боровского радиуса, так что мы не будем беспокоиться о правильном асимптотическом поведении вблизи нуля и на бесконечности, где этот потенциал явно модифицируется, но для наших целей это не очень важно, так как вероятность обнаружить электрон вдали от средних размеров атома мала. Поэтому можно ожидать, что ошибка в расчетах будет подавлена. Кроме того, по-видимому, значение \bar{Z} близко к заряду ядра: $|\bar{Z} - Z|/Z \ll 1$.

Поскольку основное состояние обладает минимальной энергией из всех связанных состояний, можно считать параметр самосогласованного поля \bar{Z} свободным, и использовать это обстоятельство для минимизации энергии связи основного состояния.

В заданном поле энергия основного состояния равна удвоенной энергии связи основного состояния в одноэлектронном, водородоподобном атоме с зарядом ядра \bar{Z} :

$$E_0 = -\bar{Z}^2.$$

В электронной конфигурации $1s^2$ каждый из электронов имеет пространственную волновую функцию (в атомных единицах)

$$\psi(r) = \sqrt{\frac{\bar{Z}^3}{\pi}} e^{-\bar{Z}r}.$$

Для пары электронов

$$\psi(r_A, r_B) = \psi(r_A) \psi(r_B)$$

— это правильная волновая функция с полным орбитальным моментом, равным нулю. Поскольку она симметрична по перестановкам электронов, полный спин может быть равен только нулю, спиновая функция которого антисимметрична. Основное состояние гелия — синглет, парагелий, а состояние ортогелия запрещено в конфигурации $1s^2$.

Вычислим матричный элемент возмущения

$$\bar{V} = \frac{\bar{Z} - Z}{r_A} + \frac{\bar{Z} - Z}{r_B} + \frac{1}{|\mathbf{r}_A - \mathbf{r}_B|}$$

по состоянию электронной конфигурации основного состояния, для того чтобы получить поправку к энергии в первом приближении. Для центрально симметричного вклада согласен общим выражениям для средних в атоме водорода легко находим

$$\left\langle \frac{\bar{Z} - Z}{r_A} + \frac{\bar{Z} - Z}{r_B} \right\rangle = 2\bar{Z}(\bar{Z} - Z).$$

Для потенциала отталкивания электронов запишем

$$I_{\text{repulsive}} = \left\langle \frac{1}{|\mathbf{r}_A - \mathbf{r}_B|} \right\rangle = \frac{\bar{Z}^6}{\pi^2} \int e^{-2\bar{Z}(r_A + r_B)} \frac{d^3\mathbf{r}_A d^3\mathbf{r}_B}{|\mathbf{r}_A - \mathbf{r}_B|}.$$

Замена переменных

$$\mathbf{r}_A = \frac{1}{2\bar{Z}} \mathbf{x}, \quad \mathbf{r}_B = \frac{1}{2\bar{Z}} \mathbf{y},$$

дает

$$I_{\text{repulsive}} = \frac{\bar{Z}}{2^5 \pi^2} \int e^{-(x+y)} \frac{d^3\mathbf{x} d^3\mathbf{y}}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|}.$$

Вычислим интеграл по косинусу угла κ между векторами: $|\mathbf{x} - \mathbf{y}| = \sqrt{x^2 - 2xy\kappa + y^2}$,

$$\int_{-1}^{+1} \frac{d\kappa}{\sqrt{x^2 - 2xy\kappa + y^2}} = -\frac{\sqrt{x^2 - 2xy\kappa + y^2}}{xy} \Big|_{-1}^{+1} = \frac{1}{xy} \{x + y - |x - y|\}.$$

Из-за модуля интегрирование по x и y разбивается на две области: $x > y$ и $x < y$. Однако в силу симметрии интеграла по перестановке переменных можно ограничиться лишь одной из областей, удвоив результат. Именно, в области $y < x$ интеграл по косинусу угла равен

$$\frac{1}{xy} \{x + y - x + y\} = \frac{2}{x}.$$

Тогда

$$I_{\text{repulsive}} = 2 \frac{\bar{Z}}{2^5 \pi^2} 4\pi 2\pi \int_0^\infty 2 dx x e^{-x} \int_0^x dy y^2 e^{-y} = \bar{Z} \int_0^\infty dx x e^{-x} \int_0^x dy y^2 e^{-y},$$

где мы учли элементарное интегрирование по углам. Оставшиеся интегралы легко берутся по частям

$$\int_0^x dy y^2 e^{-y} = -x^2 e^{-x} - 2x e^{-x} - 2e^{-x} + 2,$$

$$\int_0^\infty dx \{ -x^3 e^{-2x} - 2x^2 e^{-2x} - 2x e^{-2x} + 2x e^{-x} \} = -\frac{3!}{16} - \frac{2 \cdot 2!}{8} - \frac{2}{4} + 2 = \frac{5}{8}.$$

В итоге, энергия отталкивания

$$I_{\text{repulsive}} = \frac{5}{8} \bar{Z}.$$

С учетом поправки

$$\langle \bar{V} \rangle = 2\bar{Z}(\bar{Z} - Z) + \frac{5}{8} \bar{Z}$$

энергия основного состояния атома гелия

$$E = E_0 + \langle \bar{V} \rangle = -\bar{Z}^2 + 2\bar{Z}(\bar{Z} - Z) + \frac{5}{8} \bar{Z}.$$

Найдем экстремум этого выражения: он отвечает минимальному значению энергии основного состояния,

$$\frac{dE}{d\bar{Z}} = -2\bar{Z} + 4\bar{Z} - 2Z + \frac{5}{8} = 0 \quad \Rightarrow \quad \bar{Z} = Z - \frac{5}{16}.$$

В экстремуме $\langle \bar{V} \rangle = 0$, так что энергия связи

$$E = -\left(Z - \frac{5}{16}\right)^2. \quad (8.10)$$

Численно для гелия

$$E \approx -2.85,$$

что следует сравнить с экспериментальным значением

$$E_{\text{exp}} \approx -2.90.$$

Различие этих чисел составляет менее 2%, что, с одной стороны, выглядит неплохо, но, с другой, если учесть высокую точность экспериментальных данных, совершенно недостаточно для того, чтобы считать такой расчет успешным.

Конечно, можно продолжить расчеты, оценив вклад второй поправки, которая, как помним, для основного состояния всегда отрицательна.

Задача 4. Вычислить вклад конфигурации $1s2s$ в поправку второго порядка для энергии связи основного состояния атома гелия.

Решение. Найдем матричный элемент кулоновского вклада в возмущение

$$\langle 1s | \frac{\bar{Z} - Z}{r} | 2s \rangle,$$

где волновая функция $2s$ -уровня

$$\psi_{2s}(r) = \frac{\bar{Z}^{3/2}}{2\sqrt{2\pi}} \left(1 - \frac{1}{2} \bar{Z}r\right) e^{-\bar{Z}r/2}.$$

Тогда

$$\langle 1s | \frac{\bar{Z} - Z}{r} | 2s \rangle = \frac{4\sqrt{2}}{27} \bar{Z} (\bar{Z} - Z).$$

Вклад энергии отталкивания электронов вычисляется также, как и в случае матричного элемента для конфигурации $1s^2$, с тем отличием, что теперь уже интеграл не является симметричным по перестановке электронов. Тогда элементарное интегрирование дает

$$\langle 1s^2 | \frac{1}{|\mathbf{r}_A - \mathbf{r}_B|} | 1s2s \rangle = \frac{2^{12}\sqrt{2}}{3^3 7^4} \bar{Z}.$$

Возмущение не зависит от спинов электронов, поэтому его матричный элемент отличен от нуля только для состояний с одинаковым суммарным спином электронов: правило $\Delta S = 0$. Значит, в

конфигурации $1s2s$ необходимо взять состояние с полным спином $S = 0$, как и в основном состоянии. Таким образом, антисимметричное по перестановкам электронов спиновое состояние задает симметричную пространственную волновую функцию

$$\psi_0^{1s2s} = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ \psi_{1s}(r_A) \psi_{2s}(r_B) + \psi_{2s}(r_A) \psi_{1s}(r_B) \}.$$

Легко заметить, что это приводит к дополнительному фактору $\sqrt{2}$ для уже вычисленных матричных элементов по конфигурациям:

$$\langle 1s^2 | \bar{V} | \psi_0^{1s2s} \rangle = \frac{8}{27} \bar{Z} \left\{ \bar{Z} - Z + \frac{2^{10}}{7^4} \right\}.$$

Отметим, что также, как и в основном состоянии, вклад притяжения компенсируется отталкиванием электронов. Поскольку разность энергий уровней

$$\Delta E = E_{1s} - E_{2s} = -\frac{\bar{Z}^2}{2} \left(1 - \frac{1}{4} \right) = -\frac{3}{8} \bar{Z}^2,$$

вторая поправка к энергии основного состояния атома гелия за счет конфигурации $1s2s$ имеет величину

$$\delta_2 E = \frac{|\langle \bar{V} \rangle|^2}{\Delta E} = -\frac{2^9}{3^7} \left\{ \bar{Z} - Z + \frac{2^{10}}{7^4} \right\}^2 \sim -0.003.$$

Как видим, с одной стороны, эта поправка достаточно мала, чтобы считать сходимость ряда теории возмущений достаточной быстрой, а с другой стороны, она, очевидно, улучшает согласие оценки энергии основного состояния атома гелия с экспериментальным значением, если принять во внимание и вклады других электронных конфигураций: в проведенном расчете вклады притяжения и отталкивания по отдельности составляют -0.02 и -0.04 , но они деструктивно интерферируют, хотя абсолютные величины этих вкладов указывают на то, что принципиально можно существенно приблизить теоретические расчеты к экспериментальному значению. Впрочем, выбранный нами класс самосогласованного поля существенно ограничен однопараметрической функцией, так что разумное расширение этого класса приводит к более точному результату уже при учете поправки первого порядка по возмущению. Наконец, отметим, что согласие теоретических оценок с заданной экспериментом точностью достигается, например, вариационным методом в некоем классе восьми-параметрических пробных функций, что, конечно, эквивалентно расчетам в первом порядке теории возмущений с самосогласованным полем, зависящим от восьми же параметров. ■

Отметим, что сделанная нами оценка энергии связи в атоме гелия в первом порядке совпадает, как нетрудно видеть, с расчетом вариационным методом, если искать волновую функцию в классе пробных функции основного состояния атома водорода со свободным параметром — эффективным зарядом ядра \bar{Z} .

На рис. 5.1 показаны плотности вероятности распределения $1s$ -электронов в зависимости от расстояния до ядра для поля с зарядом $Z = 2$ и $\bar{Z} = Z - 5/16$.

Из этого рисунка (*слева*) видно, что волновая функция существенно модифицируется за счет экранировки ядра: электрон в среднем дальше от ядра. Поэтому приближение, в котором полем электронов пренебрегается, не может быть достаточно точным: в ведущем приближении энергия основного состояния за счет притяжения к ядру $E_0 \mapsto -Z^2 = -4$, что слишком сильно (на 30%) отличается от экспериментального значения.

Таким образом, метод самосогласованного поля позволяет существенно улучшить численные оценки для энергии связи в многоэлектронных атомах.

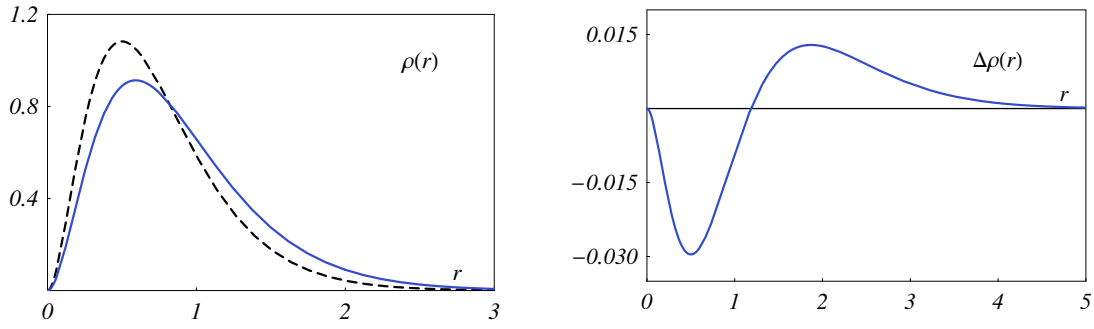


Рис. 5.1: Слева: плотности вероятности распределения $1s$ -электронов в зависимости от расстояния до ядра для поля с зарядом $Z = 2$ (штриховая линия) и $\bar{Z} = Z - 5/16$ (сплошная линия); справа: поправка к распределению за счет примеси $2s$ -состояния при $\bar{Z} = Z - 5/16$.

На рис. 5.1 (справа) показано, насколько модифицируется распределение электрона из-за возмущения за счет примеси $2s$ -уровня. Отсюда видно, что самосогласованное поле нужно очень тонко подстроить с процентной точностью, чтобы снизить расхождение результатов расчета с экспериментом в ведущем приближении.

Итак, мы обрисовали в общих чертах, как работает метод самосогласованного поля в сложной задаче описания многоэлектронных систем на примере атома гелия. Важно иметь в виду, что типичные энергии связи электронов в атоме порядка одного Ридберга, т.е. 10 эВ, получаются в методе самосогласованного поля с точностью до нескольких процентов. Значит, поправки, обусловленные отличием самосогласованного поля от потенциала взаимодействия электронов с ядром и друг с другом, могут быть порядка 0.1 – 1 эВ.

8.6. Релятивистские поправки: электронные термы

Релятивистские поправки к движению электрона в самосогласованном поле подобны рассмотренным нами поправкам для электрона в статическом сферически симметричном потенциале, так как метод самосогласованного поля формально сводит задачу с многими электронами к задаче для одного электрона. Здесь нас будут интересовать поправки, зависящие от спина. Тогда согласно результатам для электрона в статическом поле возмущение за счет спин-орбитального взаимодействия будет иметь вид

$$V_{sl} = \sum_{f=A,B} \frac{e\hbar^2}{2m^2c^2} \frac{V'(r_f)}{r_f} (\mathbf{s}_f \cdot \mathbf{l}_f), \quad (8.11)$$

где $V(r)$ — самосогласованное поле, а индекс f нумерует электроны в системе. Следует иметь в виду, что правильные волновые функции ведущего приближения имеют определенное значение суммарного орбитального момента электрона и антисимметричны по перестановкам электронов с учетом спиновой части волновой функции, что отвечает определенному значению полного спина. Это термы — ^{2S+1}L . Спин-орбитальное возмущение, очевидно, коммутирует с квадратами суммарного орбитального момента \mathbf{L}^2 и полного спина \mathbf{S}^2 , так что L и S — квантовые числа даже с учетом возмущения.

Однако спин-орбитальное взаимодействие сохраняет только вектор полного момента электрона $\mathbf{j}_f = \mathbf{l}_f + \mathbf{s}_f$. В итоге, единственная величина, которая сохраняется для элек-

тронной системы — это полный момент всех электронов $\mathbf{J} = \sum_f (\mathbf{l}_f + \mathbf{s}_f) = \mathbf{L} + \mathbf{S}$, где $\mathbf{L} = \sum_f \mathbf{l}_f$, $\mathbf{S} = \sum_f \mathbf{s}_f$. Значит, термы потенциального описания ^{2S+1}L будут, вообще говоря, расщепляться в зависимости от значения полного момента J . Величина расщепления за счет релятивистских поправок, как мы уже знаем, имеет относительную величину порядка $\alpha_{\text{ем}}^2 \sim 10^{-4}$, т.е. 10^{-3} эВ, что намного меньше расщепления за счет отличия потенциала от центрально симметричного самосогласованного поля. Таким образом, после учета спин-орбитального взаимодействия электронные термы обозначают символом

$$^{2S+1}L_J.$$

Обсуждение технического вопроса расчета спин-орбитального расщепления мы отложим до следующей темы — многоэлектронные атомы.

Тема 6

Сложный атом

Лекция № 9

Факторизация волновой функции для электронов в самосогласованном центрально симметричном поле, статистика Ферми и определитель Слетера, разложение состояния конфигурации по базису с допустимыми значениями полного спина электронов и их суммарного орбитального момента, квантовые числа заполненной оболочки, иерархия термов – первое правило Хунда и аргументы в его пользу, задача о термах атома углерода, оценка спин-орбитальных релятивистских поправок, усреднение по конфигурации и LS -связь, термы J и правило интервалов Ланде, понятие «дырки», знак константы спин-орбитального взаимодействия и второе правило Хунда.

Как мы убедительно показали на примере атома гелия, наиболее ясное и последовательное построение теории сложного атома – многоэлектронной системы с неподвижным ядром – основано на методе самосогласованного поля. Поэтому в ведущем приближении состояние электронов характеризуется конфигурацией, т.е. пространственной волновой функцией, которая представляется в факторизованном виде как произведение одноэлектронных состояний с набором квантовых чисел: главного n , орбитального l и магнитного m , $k \equiv \{n, l, m\}$. После этого необходимо учесть принцип Паули для фермионов, т.е. статистику Ферми.

9.1. Определитель Слетера

В атоме с N электронами конфигурация считается заданной, если указаны квантовые числа каждого из электронов $\{k_1, k_2, \dots, k_N\}$, а значит, и отвечающий этому набор пространственных волновых функций $\{\psi_{k_1}(\mathbf{r}_1), \dots, \psi_{k_N}(\mathbf{r}_N)\}$. В ведущем приближении спин электрона коммутирует с гамильтонианом, поэтому состояние электрона факторизуется на произведение пространственной и спиновой волновых функций: $|k, m_s\rangle$. Для удобства обозначений вводят “координату”

$$x \equiv \{\mathbf{r}, m_s\},$$

так что состояние описывается волновой функцией, составленной из произведений типа

$$\psi_{k_1}(\mathbf{r}_1, m_1^s) \cdots \psi_{k_N}(\mathbf{r}_N, m_N^s) \equiv \psi_{k_1}(x_1) \cdots \psi_{k_N}(x_N),$$

которую необходимо антисимметризовать по перестановкам электронов. Результатом антисимметризации является определитель Слетера

$$\Phi_{k_1, \dots, k_N}(x_1, \dots, x_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \det \begin{pmatrix} \psi_{k_1}(x_1) & \cdots & \psi_{k_N}(x_1) \\ \vdots & \cdots & \vdots \\ \psi_{k_1}(x_N) & \cdots & \psi_{k_N}(x_N) \end{pmatrix}, \quad (9.1)$$

который антисимметричен по перестановке $x_i \leftrightarrow x_j$ вследствие свойства определителя по перестановке любой пары строк. Здесь нормировка фиксирована для случая ортонормированных состояний.

Затем, следуя той же схеме, что и при рассмотрении атома гелия, спиновые состояния в определителе Слетера разложим по состояниям с допустимыми значениями полного, суммарного, спина электронов. Это, очевидно, всегда можно сделать, следуя той же методе, что и при сложении моментов: любое состояние из спинового базиса тензорного произведения состояний можно разложить по базису состояний с допустимыми значениями суммы спинов, только, если в случае двух электронов, коэффициентами разложения были уже известные нам символы Клебша–Гордана, то для большего количества слагаемых спинов решается аналогичная задача, сложность которой возрастает с ростом числа электронов.

Те же аргументы справедливы и для преобразования базиса для орбитальных моментов электронов.

В итоге, определитель Слетера разлагается по базису состояний с допустимыми значениями суммарного орбитального момента электронов L и их полного спина S ,

$$\Phi_{k_1, \dots, k_N}(x_1, \dots, x_N) = \sum \Psi_{\{k_1, \dots, k_N\}}^{LS}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) |L, M; S, M_s\rangle, \quad (9.2)$$

где M — проекция суммарного орбитального момента, M_s — проекция полного спина, а суммирование ведется по L и S с учетом перестановок квантовых чисел в конфигурации и проекций орбитального момента и спина электронов.

Безусловно, решение такой задачи разложения конфигурации по базису с допустимыми значениями суммарных спина и орбитального момента строится в каждом конкретном случае, но имеется одно исключительное обстоятельство, когда решение известно и определено однозначно. Именно, рассмотрим оболочку nl . Проекции момента имеют $2l + 1$ значений. Каждой проекции момента отвечают два допустимых значения проекции спина электрона, так что максимальная степень заполнения оболочки согласно принципу Паули $2(2l + 1)$. Пусть конфигурация имеет вид $nl^{2(2l+1)}$, т.е. все возможные состояния заняты. Это — заполненная оболочка. Ей отвечают значения

$$M = 0, \quad M_s = 0,$$

потому что заняты все состояния проекции l и все состояния проекции спина электрона.

Действие на такое состояние повышающих операторов полного спина и суммарного орбитального момента сохраняют конфигурацию, ее квантовые числа nl , а также и S , но либо дают состояние с $M_s = 1$ и $M = 1$ соответственно, либо нулевые векторы. Первая возможность исключена принципом запрета Паули, так как мы уже установили, что значения суммарных проекций спина и орбитального момента для заполненной оболочки строго фиксированы. Значит, операция повышения, а равно и понижения, дают тождественные нули, что отвечает единственному состоянию с $L = 0$ и $S = 0$. Поэтому конфигурация заполненной оболочки имеет фиксированные нулевые значения суммарных спина и орбитального момента.

Таким образом, вклад заполненных оболочек в разложение конфигурации в сумму по термам строго определен и всегда отфакторизован, так как заполненные оболочки дают нуль при расчете полного спина и орбитального момента конфигурации.

9.2. Поправки к центральному потенциалу: термы

Как мы уже знаем, в силу обменного взаимодействия состояния с различными значениями полного спина электронов обладают разными значениями энергии связи. Мы убедились на примере атома гелия, что минимальное значение энергии имеет состояние с максимальным

допустимым значением спина. Физическое обоснование этого факта вполне прозрачно: состояние с максимальным спином симметрично по перестановкам электронов, а это означает, что вероятность обнаружить электроны в одной точке равна нулю — пространственная волновая функция антисимметрична, и следовательно, вероятность найти электроны близко друг к другу подавлена, откуда мы заключаем, что положительный вклад в энергию за счет отталкивания электронов подавлен.

Кроме того, парные потенциалы взаимодействия электронов друг с другом коммутируют с суммарным орбитальным моментом, так что правильные волновые функции, для которых возмущение в виде парных взаимодействий диагонально, — состояния с заданным значением полного орбитального момента L . В итоге, после учета поправок к центральному самоогласованному полю приходим к уровням энергии конфигурации, которые расщепляются по термам ^{2S+1}L .

Для порядка следования термов установлено эмпирическое правило Хунда.

Первое правило Хунда. Энергия конфигурации имеет минимальное значение при максимально допустимом значении полного спина S ; при этом значении полного спина минимальное значение имеет терм с максимально допустимым значением суммарного орбитального момента электронов L .

Требование максимального значения орбитального момента по своей природе аналогично рассуждениям о подавлении энергии отталкивания электронов: при большем орбитальном моменте электроны реже находятся вблизи друг к другу.

Это правило в сочетании с установленным нами свойством заполненной оболочки позволяет установить основное состояние—терм для атома химического элемента в периодической системе элементов Менделеева.

Задача 5. Определить термы и основное состояние атома углерода: конфигурация $1s^2 2s^2 2p^2$.

Решение. В этой конфигурации две заполненных s -оболочки, которые не участвуют в определении термов. Пара $2p$ -электронов может быть распределена по $2(2l+1)$ состояниям с различными проекциями спина и орбитального момента $l = 1$

$$C_6^2 = \frac{6!}{2!4!} = 15$$

способами.

Максимальное значение спина электронов $S = 1$ является симметричным по перестановкам электронов. Сложение орбитальных моментов электронов $1 + 1$ дает $L = 0, 1, 2$, причем максимальное значение $L = 2$ также является симметричным по перестановкам, значит, оно запрещено для $S = 1$, так как в противном случае состояние было бы симметричным, что противоречит статистике Ферми. Состояние с $L = 0$ также является симметричным по перестановке двух электронов, поэтому оно также запрещено для $S = 1$. В итоге, единственный триплетный терм

$$^3P.$$

Число таких состояний $(2S+1)(2L+1) = 3 \cdot 3 = 9$.

При $S = 0$ спиновое состояние является антисимметричным по перестановкам, поэтому допустимы только симметричные орбитальные состояния двух электронов, т.е. $L = 0, 2$. Соответствующие термы

$$^1S, \quad ^1D,$$

имеют вырождение по проекциям спина и момента

$$1 + 5 = 6.$$

Суммарное число вырождения конфигурации 15 совпадает с суммарным числом состояний термов, которые расщепляются вследствие учета поправок к самосогласованному полю.

Основное состояние согласно правилу Хунда — 3P . ■

9.3. Релятивистские поправки

Масштаб релятивистских поправок в атоме определяется, вообще говоря, величиной $Z\alpha_{\text{ем}}$. Этот параметр может быть довольно большим для тяжелых ядер по сравнению с рассмотренным нами случаем атомов водорода и гелия, где электроны заведомо двигались нерелятивистски. Но при этом необходимо принять во внимание эффект экранировки ядра: электроны внешних незаполненных оболочек, определяющие термы, взаимодействуют не только с ядром, но и с электронами заполненных оболочек, находящихся ближе к ядру, так что фактически заряд центрально симметричного самосогласованного поля для внешних электронов невелик, и, кроме того, как мы увидим в дальнейшем, вклад релятивистских поправок для электронов на заполненных оболочках с нулевыми значениями полного спина и орбитального момента не может зависеть от спин-орбитальных характеристик терма, т.е. приводит к смещению терма как целого.

В самосогласованном поле $V(r)$ зависящие от спина электронов релятивистские поправки обусловлены потенциалом

$$V_{sl} = \sum_f \frac{e\hbar^2}{2m^2c^2} \frac{V'(r_f)}{r_f} (\mathbf{s}_f \cdot \mathbf{l}_f), \quad (9.3)$$

где f нумерует электроны в системе. Мы показали, что это возмущение сохраняет для каждого электрона в отдельности его полный момент $\mathbf{j}_f = \mathbf{l}_f + \mathbf{s}_f$. Поэтому для терма в целом сохраняется только полный момент всех электронов

$$\mathbf{J} = \sum_f (\mathbf{l}_f + \mathbf{s}_f) = \mathbf{L} + \mathbf{S}, \quad \text{где} \quad \mathbf{L} = \sum_f \mathbf{l}_f, \quad \mathbf{S} = \sum_f \mathbf{s}_f.$$

Значит, термы потенциального описания ${}^{2S+1}L$ будут, вообще говоря, расщепляться в зависимости от значения полного момента J .

Спин-орбитальные операторы в возмущении (9.3) не выражаются через полный спин и орбитальный момент электронов. Но для расчета поправки к энергии за счет этого возмущения необходимо взять его среднее по правильным функциям ведущего приближения. Мы будем полагать, что расщепление термов за счет релятивистских поправок мало¹ по сравнению с расщеплением конфигурации по термам в самосогласованном поле ${}^{2S+1}L$. Тогда среднее можно вычислить в два этапа.

На первой стадии усредним по пространственной волновой функции конфигурации с фиксированными значениями квантовых чисел терма. В итоге должен получиться оператор, зависящий только от суммарного орбитального момента \mathbf{L} и полного спина \mathbf{S} , причем этот оператор должен быть скаляром, линейным по спину, так что

$$\langle L, M; S, M_S | V_{sl} | L, M; S, M_S \rangle = A_{LS} (\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}). \quad (9.4)$$

¹Напомним, что мы опускаем за скобки случай, когда эффективный заряд притяжения настолько велик, что релятивистские поправки оказываются сравнимы с поправкой к самоогласованному полю.

Значение константы спин-орбитального взаимодействия A_{LS} в (9.4) определяется расчетом средних для конкретных конфигураций, но его масштаб и знак можно оценить также из следующих соображений.

Во-первых, вклад в спин-орбитальное взаимодействие электронов на заполненных оболочках равен нулю, потому что их спин и орбитальный момент равны нулю. Значит, необходимо рассматривать только внешние электроны на незаполненных оболочках. Во-вторых, если внешняя оболочка заполнена менее, чем наполовину, принцип запрета Паули не приводит к существенным корреляциям спина электронов, поэтому в среднем можно считать, что для электрона на внешней оболочке с n_f электронами его спин

$$\mathbf{s}_f \approx \frac{1}{n_f} \mathbf{S},$$

т.е. каждый электрон несет равную часть полного спина на внешней оболочке. При этом, конечно, среднее расстояние электронов на внешней оболочке от ядра можно считать примерно одинаковым: $r_f \mapsto \langle r \rangle$. Значит,

$$\langle V_{sl} \rangle_{LS} \approx \sum_{f=1}^{n_f} \frac{e\hbar^2}{2m^2c^2} \frac{\langle V' \rangle}{\langle r \rangle} \frac{1}{n_f} (\mathbf{S} \cdot \mathbf{l}_f) = \frac{e\hbar^2}{2m^2c^2} \frac{\langle V' \rangle}{\langle r \rangle} \frac{1}{n_f} (\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}). \quad (9.5)$$

Поскольку электроны притягиваются к центру самоогласованного поля

$$e \langle V' \rangle > 0,$$

причем для внешних электронов заряд экранированного ядра $-en_f$, т.е. $V \sim -en_f/r$. Значит, константа спин-орбитального взаимодействия оказывается положительной порядка

$$A_{LS} \sim \frac{e^2\hbar^2}{m^2c^2} \frac{1}{a^3} \sim mc^2 \alpha_{\text{em}}^4 > 0. \quad (9.6)$$

Конечно, точное значение вычисляется в зависимости от самосогласованного поля и конфигурации атома.

После этого второй этап усреднения довольно прост, так как возникший оператор диагонален в базисе с допустимым значением полного момента $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$:

$$\mathbf{J}^2 = (\mathbf{L} + \mathbf{S})^2 \Rightarrow J(J+1) = L(L+1) + 2(\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}) + S(S+1). \quad (9.7)$$

Поэтому

$$\langle V_{ls} \rangle = \frac{1}{2} A_{LS} \{J(J+1) - L(L+1) - S(S+1)\}. \quad (9.8)$$

Отсюда следует

Правило интервалов Ланде. Расщепление термов вследствие спин-орбитального взаимодействия происходит с равными интервалами по J .

В самом деле, интервал расщепления терма

$$\Delta \langle V_{ls} \rangle = A_{LS} \Delta J, \quad \Delta J \in \mathbb{N}.$$

Теперь рассмотрим ситуацию, когда оболочка заполнена более, чем наполовину. В этом случае существенным становится правило запрета Паули, которое особенно ярко проявляется, если оболочка заполнена полностью: спины электронов строго коррелированы так, что

дают в сумме нуль. Заполненная оболочка не участвует в формировании сдвига уровней за счет спин-орбитального взаимодействия. Если с заполненной оболочки снять один электрон, то получится незаполненная оболочка, причем операция снятия электрона очевидно эквивалентна представлению, когда к электрону на заполненной оболочке добавляется «дырка» (hole) — частица, движущаяся совместно с электроном по той же траектории, заряд которой полностью компенсирует заряд электрона: это эффективная частица противоположного заряда. Спин дырки компенсирует спин электрона. Значит, если снять с заполненной оболочки n_h электронов, число которых менее половины максимальной степени заполнения оболочки, то это эквивалентно добавлению n_h дырок, спин которых компенсирует спин снятых электронов:

$$\sum_{f=1}^{n_h} \tilde{s}_f - \sum_{h=1}^{n_h} s_h = 0.$$

Тогда, с одной стороны, спин электронов на оболочке заполненной более, чем наполовину,

$$\mathbf{S} = \sum_f \mathbf{s}_f,$$

а с другой, его можно получить, добавляя сначала электроны, чтобы полностью заполнить оболочку, а потом дырки, чтобы вернуться к исходной конфигурации:

$$\mathbf{S} = \sum_f \mathbf{s}_f + \sum_{f=1}^{n_h} \tilde{\mathbf{s}}_f - \sum_{h=1}^{n_h} \mathbf{s}_h.$$

Но на заполненной оболочке спин равен тождественному нулю

$$\sum_f \mathbf{s}_f + \sum_{f=1}^{n_h} \tilde{\mathbf{s}}_f = 0,$$

так что

$$\mathbf{S} = - \sum_{h=1}^{n_h} \mathbf{s}_h = -\mathbf{S}_h.$$

Значит, полный спин электронов на заполненной более чем наполовину оболочке равен полному спину дырок на этой оболочке, взятому со знаком минус. Поэтому задача о спин-орбитальном расщеплении в этом случае сводится к задаче о движении дырок на этой оболочке, причем дырочная оболочка оказывается заполненной менее, чем наполовину, а спин дырок противоположен спину электронов. В итоге, решение задачи об оценке константы спин-орбитального взаимодействия повторяет проведенное выше рассмотрение для оболочки, заполненной менее, чем наполовину, и после замены спина дырок на спин электронов находим

$$\langle L, M; S, M_S | V_{sl} | L, M; S, M_S \rangle = -A_{LS}^h (\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}), \quad (9.9)$$

где $A_{LS}^h > 0$ — положительная константа спин-орбитального взаимодействия для дырок.

Таким образом, устанавливается следующее

Второе правило Хунда. Если оболочка заполнена менее, чем наполовину, то после учета релятивистских поправок наименьшее значение энергии имеет терм с минимальным допустимым значением полного момента $J = |L - S|$, а если оболочка заполнена более, чем наполовину, то наименьшее значение энергии имеет терм с максимальным допустимым значением полного момента $J = L + S$.

В самом деле, из формулы для поправки за счет спин-орбитального взаимодействия (9.8) следует, что при $A_{LS} > 0$ наименьшая энергия у состояния с минимальным значением полного момента, а при $A_{LS} < 0$ наименьшая энергия у состояния с максимальным значением полного момента, что и имеет место при соответствующих условиях заполнения оболочки.

Например, в атоме углерода основное состояние отвечает терму 3P_0 , а термы ${}^3P_{1,2}$ находятся последовательно выше согласно правилу интервалов Ланде.

Порядок получения термов с учетом релятивистских поправок, рассмотренный нами, носит название метода LS -связи или рассель-саундеровского подхода. Он применим в тех случаях, когда расщепление термов из-за обменного взаимодействия и поправок к самосогласованному полю намного больше расщепления за счет взаимодействия спин-орбита. Мы уже упоминали, что в редких случаях имеет место обратная картина: спин-орбитальные взаимодействия больше поправок к самосогласованному полю, — тогда говорят о jj -связи, так как доминирующие операторы в возмущении имеют вид $(\mathbf{l}_f \cdot \mathbf{s}_f)$, и они диагональны в базисе полных моментов для электронов $\mathbf{j}_f = \mathbf{l}_f + \mathbf{s}_f$. Поэтому правильные функции ведущего приближения — состояния с заданными моментами электронов, и поэтапное усреднение по этим состояниям сводится к сложению моментов электронов $\mathbf{j} + \mathbf{j}$, а не к сложению их орбитального и спинового моментов $\mathbf{L} + \mathbf{S}$. Мы не будем здесь останавливаться на более подробном описании свойств jj -связи.

В заключение, мы изложили в этой лекции лишь качественные основы теории много-электронных атомов, ибо сам этот предмет, лежащий в основе периодической системы химических элементов Менделеева, наряду с теорией молекул безусловно заслуживает более подробного освещения в отдельном курсе квантовой химии.

Задача 6. Определить термы атома азота: конфигурация $1s^2 2s^2 2p^3$.

Решение. Три $2p$ -электрона на незаполненной оболочке могут быть распределены по $2(2l + 1)$ состояниям с различными проекциями спина и орбитального момента $l = 1$

$$C_6^3 = \frac{6!}{3!3!} = 20$$

способами.

Максимальное значение спина электронов $S = \frac{3}{2}$ является симметричным по перестановкам электронов, и оно возможно только, если электроны в проекции полного спина $\frac{3}{2}$ занимают состояния с различными значениями проекции орбитального момента: схема расположения p -электронов с различными проекциями орбитального момента $m = \boxed{+1} \boxed{0} \boxed{-1}$ в этом случае — $\boxed{\uparrow} \boxed{\uparrow} \boxed{\uparrow}$, а значит, при проекции суммарного орбитального момента $M = 0$, т.е. исключительно при $L = 0$. Поэтому при максимальном значении спина электронов единственный терм

$${}^4S \mapsto {}^4S_{3/2}.$$

Число таких состояний $(2S + 1)(2L + 1) = 4 \cdot 1 = 4$.

При $S = \frac{1}{2}$ допустимые значения суммы проекций орбитального момента $M = \pm 2, \pm 1, \pm 0$. Термы с максимальными значениями $|M| = 2$ отвечают $L = 2$

$${}^2D \mapsto {}^2D_{5/2}, {}^2D_{3/2},$$

и они имеют вырождение по проекциям спина и момента

$$2 \cdot 5 = 10, \quad \text{или} \quad \sum_J (2J + 1) = 6 + 4 = 10.$$

Состояния с $M_S = +\frac{1}{2}$ и $M = +1$ — это $\boxed{\uparrow\downarrow}\boxed{}\boxed{\uparrow}$ и $\boxed{\uparrow}\boxed{\uparrow\downarrow}\boxed{}$. Одна из суперпозиций отвечает терму с $S = \frac{3}{2}$ и $L = 2$, а другая, следовательно, терму с $S = \frac{1}{2}$ и $L = 1$. Значит, в конфигурации есть терм

$$^2P \mapsto ^2P_{3/2}, ^2P_{1/2},$$

который имеет вырождение по проекциям спина и орбитального момента $2 \cdot 3 = 6$ или по проекциям полного момента $4 + 2 = 6$.

Состояния с $M_S = +\frac{1}{2}$ и $M = 0$ включают в себя симметричное по перестановкам крайних электронов состояние $\boxed{\uparrow\downarrow\uparrow}$ и суперпозицию $\boxed{\downarrow\uparrow\uparrow} \pm \boxed{\uparrow\uparrow\downarrow}$, с положительной и отрицательной четностью по перестановкам крайних электронов. Из этих состояний можно составить только пару суперпозиций, отвечающих термам 2D и 2P , в то время как состояний с $L = 0$ нет. В этом можно убедиться, суммируя количество состояний в термах: $^2D + ^2P + ^4S = 10 + 6 + 4 = 20$, которое исчерпывает степень вырождения конфигурации по проекциям орбитального момента и спина.

Основное состояние азота согласно правилам Хунда — $^4S_{3/2}$. ■

Тема 7

Феноменология: атом во внешнем поле

Лекция № 10

Взаимодействие атома с постоянным магнитным полем, магнитный момент электронов, наведенный диамагнитный вклад, масштаб сильного и слабого магнитных полей, расщепление терма с $J \neq 0$ в слабом поле — аномальный эффект Зеемана, применение теоремы Вигнера–Эккарта для матричного элемента полного спина, фактор Ланде для терма, снятие вырождения, диамагнетизм атомов с заполненными оболочками, явление парамагнетизма Ван-Флека для терма с $J = 0$, расщепление терма в сильном магнитном поле — эффект Пашена–Бака, остаточное вырождение.

10.1. Атом в магнитном поле: энергия взаимодействия электронов

Гамильтониан взаимодействия электронов атома с постоянным внешним магнитным полем включает в себя вклад вектор-потенциала за счет ковариантной производной и ведущую поправку взаимодействия собственного магнитного момента с полем \mathcal{H}

$$H = \sum_f \left\{ \frac{1}{2m} \left(\mathbf{p}_f - \frac{e}{c} \mathcal{A}(\mathbf{r}_f) \right)^2 + (\boldsymbol{\mu}_f \cdot \mathcal{H}) \right\} + V, \quad (10.1)$$

где V — потенциал, включающий в себя как нерелятивистские вклады кулоновского взаимодействия электронов с ядром и попарно друг с другом, так и релятивистские поправки, зависящие от спина. Магнитный момент электрона, обусловленный спином, согласно уравнению Дирака с $g = 2$

$$\boldsymbol{\mu} = g \frac{e\hbar}{2mc} \mathbf{s}.$$

Калибровка обычно фиксируется так, чтобы

$$\mathcal{A}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} (\mathcal{H} \times \mathbf{r}), \quad (10.2)$$

откуда заключаем, что

$$\operatorname{div} \mathcal{A}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} \epsilon_{\alpha\beta\gamma} \partial_\alpha \mathcal{H}_\beta x_\gamma = \frac{1}{2} \epsilon_{\alpha\beta\gamma} \mathcal{H}_\beta \delta_{\alpha\gamma} = 0.$$

Поэтому при возведении в квадрат обобщенного импульса

$$\left(\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathcal{A}(\mathbf{r}) \right)^2 = \mathbf{p}^2 - \frac{e}{c} \{ (\mathbf{p} \cdot \mathcal{A}) + (\mathcal{A} \cdot \mathbf{p}) \} + \frac{e^2}{c^2} \mathcal{A}^2$$

вклад

$$(\mathbf{p} \cdot \mathcal{A}) + (\mathcal{A} \cdot \mathbf{p}) = 2(\mathcal{A} \cdot \mathbf{p}) - i\hbar \operatorname{div} \mathcal{A}$$

сводится к

$$2(\mathcal{A} \cdot \mathbf{p}) = \epsilon_{\alpha\beta\gamma} \mathcal{H}_\alpha x_\beta p_\gamma = \mathcal{H} \cdot (\mathbf{r} \times \mathbf{p}) = \hbar \mathcal{H} \cdot \mathbf{l},$$

т.е. возникает член взаимодействия с магнитным моментом вращения:

$$\frac{1}{2m} \left(\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathcal{A}(\mathbf{r}) \right)^2 = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} - \frac{e\hbar}{2mc} (\mathcal{H} \cdot \mathbf{l}) + \frac{e^2}{8mc^2} (\mathcal{H} \times \mathbf{r})^2. \quad (10.3)$$

Значит, гамильтониан атома в постоянном внешнем магнитном поле принимает вид

$$H = H_0^{\text{at}} + \sum_f \left\{ \mu_0 \mathcal{H} \cdot (\mathbf{l}_f + 2\mathbf{s}_f) + \frac{e^2}{8mc^2} (\mathcal{H} \times \mathbf{r}_f)^2 \right\}, \quad (10.4)$$

где H_0^{at} — гамильтониан атома в отсутствие внешних источников, а магнетон Бора $\mu_0 = e\hbar/2mc$. Суммирование орбитального момента и спина очевидно приводит к возмущению в виде взаимодействия магнитного поля с магнитным моментом электронов атома:

$$V_{\text{mag.}} = \mu_0 \mathcal{H} \cdot (\mathbf{L} + 2\mathbf{S}), \quad (10.5)$$

а квадратичный по полю член

$$V_d = \frac{e^2}{8mc^2} \sum_f (\mathcal{H} \times \mathbf{r}_f)^2 = \frac{e^2 \mathcal{H}^2}{8mc^2} \sum_f r_f^2 \sin^2 \theta_f \quad (10.6)$$

обуславливает диамагнитные свойства электронов, потому что коэффициент при квадрате поля имеет положительный знак: наведенный магнитный момент пропорционален внешнему полю $\boldsymbol{\mu}_{\text{ext.}} = B \mathcal{H}$, и он дает вклад в потенциальную энергию $U_{\text{ext.}} = -(\boldsymbol{\mu}_{\text{ext.}} \cdot \mathcal{H})$, так что, если $B < 0$, то наведенный магнитный момент направлен против внешнего поля и соответствующая энергия диамагнитной системы $V_d = -B \mathcal{H}^2 > 0$, т.е. она квадратична по полю и положительна.

Оценим по порядку величины вклад во взаимодействие магнитного момента электронов и диамагнитный член. Для этого прежде введем напряженность поля, характерную для атома:

$$\mathcal{H}_{\text{at}} = \frac{e}{a^2} \sim 2 \cdot 10^7 \text{ Гаусс.}$$

Тогда

$$\mu_0 \mathcal{H} \sim \frac{e^2 \hbar}{mca^2} \frac{\mathcal{H}}{\mathcal{H}_{\text{at}}} = \frac{e^2}{\hbar c} \frac{\hbar^2}{ma^2} \frac{\mathcal{H}}{\mathcal{H}_{\text{at}}} = mc^2 \alpha_{\text{em}}^3 \frac{\mathcal{H}}{\mathcal{H}_{\text{at}}},$$

и, если $L \neq 0$ или $S \neq 0$, энергия взаимодействия магнитного момента с постоянным магнитным полем при $\mathcal{H} \ll \alpha_{\text{em}} \mathcal{H}_{\text{at}} \sim 10^5$ Гс оказывается существенно меньше энергии спин-орбитального взаимодействия за счет релятивистских поправок.

Для диамагнитного вклада

$$V_d \sim \frac{e^2}{mc^2} a^2 \frac{e^2}{a^4} \frac{\mathcal{H}^2}{\mathcal{H}_{\text{at}}^2} = \frac{e^4}{\hbar^2 c^2} \frac{\hbar^2}{ma^2} \frac{\mathcal{H}^2}{\mathcal{H}_{\text{at}}^2} = mc^2 \alpha_{\text{em}}^4 \frac{\mathcal{H}^2}{\mathcal{H}_{\text{at}}^2}.$$

Отсюда немедленно следует, что, если магнитный момент электронов не равен тождественно нулю, то диамагнитным вкладом заведомо можно пренебречь, поскольку он сравнивается с членом магнитного момента только при гигантских полях порядка

$$\mathcal{H} \sim \frac{\mathcal{H}_{\text{at}}}{\alpha_{\text{em}}} \sim 10^9 \text{ Гс,}$$

при которых и поправки за счет магнитного момента становятся сравнимыми с энергией связи в атоме, т.е. поля становятся настолько велики, что приводят к ионизации атома, которую мы не рассматриваем.

Далее исследуем различные условия взаимодействия атома с внешним магнитным полем, используя теорию возмущений.

10.2. Аномальный эффект Зеемана

Если магнитный момент терма не равен нулю, то взаимодействие атома со слабым внешним магнитным полем $\mathcal{H} \ll \alpha_{\text{ем}} \mathcal{H}_{\text{ат}} \sim 10^5$ Гс является малым возмущением по сравнению с релятивистскими спин-орбитальными поправками. Это означает, что в качестве волновых функций ведущего приближения следует рассматривать термы $^{2S+1}L_J$.

В возмущении (10.5) магнитное поле задает выделенное направление, которое примем за направление оси z . Коммутатор

$$[J_\alpha, (\mathcal{H} \cdot \{\mathbf{J} + \mathbf{S}\})] = i \epsilon_{\alpha\beta\gamma} \mathcal{H}_\beta \{J + S\}_\gamma$$

обращается в нуль для J_z . Далее, используя алгебру коммутаторов для произведения, легко найти, что

$$[\mathbf{J}^2, (\mathcal{H} \cdot \{\mathbf{J} + \mathbf{S}\})] = 0.$$

Таким образом, квантовыми числами терма по-прежнему будет пара $\{J, M_J\}$, но вырождение по M_J , которое имело место в отсутствие магнитного поля вследствие того, что сохранялись и компоненты J_\pm : $[J_\pm, H_0^{\text{ат}}] = 0$, некоммутирующие с J_z : $[J_\pm, J_z] \neq 0$, теперь оказывается “снятым”: энергия зависит от M_J .

Для вычисления матричного элемента возмущения заметим, что операторы полного момента и спина являются неприводимыми тензорными операторами первого порядка, т.е. момента 1, так как при вращениях они преобразуются соответствующим образом — как векторы. Отсюда следует, во-первых, элементарно

$$\langle J, M_J | J_z | J, M'_J \rangle = M_J \delta_{M_J M'_J}, \quad (10.7)$$

а во-вторых,

$$[J_z, S_z] = 0,$$

и значит, S_z — это нулевая компонента векторного оператора в стандартном представлении, и согласно теореме Вигнера–Эккарта

$$\langle J, M_J | S_m | J, M'_J \rangle = \frac{\langle J || S || J \rangle}{\sqrt{2J+1}} \langle J, M_J | J, M'_J; 1, m \rangle, \quad m = \{z, \pm\}, \quad (10.8)$$

где коэффициент Клебша–Гордона отличен от нуля при $J \neq 0$ (правило запрета переходов $0 \rightarrow 0'$ за счет тензоров, не являющихся скалярами). В этом параграфе мы будем иметь ввиду это условие. Совершенно аналогично для полного момента

$$\langle J, M_J | J_m | J, M'_J \rangle = \frac{\langle J || J || J \rangle}{\sqrt{2J+1}} \langle J, M_J | J, M'_J; 1, m \rangle, \quad m = \{z, \pm\}, \quad (10.9)$$

откуда заключаем, что для одного и того же терма оператор полного спина \mathbf{S} пропорционален оператору полного момента \mathbf{J} :

$$\mathbf{S} = \Lambda \mathbf{J}, \quad (10.10)$$

где параметр Λ определяется значениями приведенных матричных элементов для заданного терма

$$\Lambda = \frac{\langle J || S || J \rangle}{\langle J || J || J \rangle}$$

и не зависит от величины проекции M_J . Определим Λ , рассчитав матричные элементы

$$\langle (\mathbf{S} \cdot \mathbf{J}) \rangle = \Lambda \langle \mathbf{J}^2 \rangle \quad \Rightarrow \quad \langle (\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}) + \mathbf{S}^2 \rangle = \Lambda J(J+1),$$

откуда

$$\Lambda = \frac{J(J+1) - L(L+1) + S(S+1)}{2J(J+1)}. \quad (10.11)$$

В итоге, матричный элемент возмущения

$$\langle V_{\text{mag.}} \rangle = \mu_0 \mathcal{H} M_J g_{\text{LSJ}}, \quad (10.12)$$

где *фактор Ланде*

$$g_{\text{LSJ}} = 1 + \frac{J(J+1) - L(L+1) + S(S+1)}{2J(J+1)}. \quad (10.13)$$

В терминах ларморовской частоты $\Omega = e\mathcal{H}/(2mc)$ расщепление уровней в терме

$$\epsilon_1(M_J) = \hbar \Omega g_{\text{LSJ}} M_J. \quad (10.14)$$

Итак, атомный терм в слабом магнитном поле расщепляется на $2J+1$ уровней, т.е. вырождение терма снимается полностью.

10.3. Диамагнетизм

Если оболочки атома заполнены полностью, как, например, у инертных газов, то $L = 0$ и $S = 0$ и магнитный момент электронов тождественно обращается в нуль. Поэтому взаимодействие такого атома с магнитным полем целиком определяется диамагнитным вкладом: атомы с заполненными электронными оболочками диамагнитны.

Поскольку состояние является сферически симметричным усреднение по углу между полем и радиус-вектором электрона проводится элементарно

$$\langle \sin^2 \theta \rangle = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 d \cos \theta \cdot \sin^2 \theta = \frac{2}{3},$$

так что зависимость энергии от поля в первом порядке теории возмущений

$$\epsilon_1(\mathcal{H}) = \frac{e^2 \mathcal{H}^2}{12mc^2} \sum_f \langle r_f^2 \rangle. \quad (10.15)$$

Отсюда магнитная восприимчивость

$$\chi = -\frac{\partial^2}{\partial \mathcal{H}^2} \epsilon_1(\mathcal{H}) = -\frac{e^2}{6mc^2} \sum_f \langle r_f^2 \rangle < 0, \quad (10.16)$$

и атомы диамагнитны.

10.4. Парамагнетизм Ван-Флека

Если $J = 0$, но $L = S \neq 0$, то согласно проведенному рассмотрению поправка первого порядка по магнитному полю тождественно обращается в нуль: «работает» правило запрета переходов $0 \rightarrow 0'$ за счет векторного оператора. Поправка второго порядка

$$\epsilon_2 = \sum_{k \neq n} \frac{|V_{kn}|^2}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}$$

включает в себя сумму по состояниям, отличным от исходного. Здесь матричный элемент, как мы уже выяснили, имеет порядок

$$|V_{kn}| \sim \mu_0 \mathcal{H} \sim mc^2 \alpha_{\text{em}}^3 \frac{\mathcal{H}}{\mathcal{H}_{\text{at}}},$$

а вот расщепление уровней существенно отличается: в терме ^{2S+1}L расщепление за счет релятивистских поправок в $\alpha_{\text{em}}^2 \sim 10^{-4}$ раз меньше, чем между уровнями в нерелятивистской системе с самосогласованным полем, и приблизительно в $10^{-2} - 10^{-3}$ раз меньше, чем расщепление конфигурации электронов за счет обменных сил и парных взаимодействий. Поэтому с довольно высокой точностью сумму можно аппроксимировать вкладом J -состояний, принадлежащих одному и тому же терму ^{2S+1}L . Тогда согласно правилу интервалов Ланде $\Delta E(J') = -A_{LS} J'$

$$\epsilon_2 \approx \sum_{J' \in \text{term}} \frac{|\langle J=0, M_J=0 | V_{\text{mag.}} | J', M' \rangle|^2}{-A_{LS} J'} \simeq -\frac{\mu_0^2 \mathcal{H}^2}{A_{LS}}. \quad (10.17)$$

Если оболочка заполнена менее, чем наполовину, то $A_{LS} > 0$, а поправка к энергии отрицательна и квадратична по магнитному полю, что отвечает парамагнетизму атома. Такой механизм магнитной поляризации носит имя парамагнетизма Ван-Флека. Поскольку константа спин-орбитального расщепления $A_{LS} \sim mc^2 \alpha_{\text{em}}^4$, а $\mu_0 \mathcal{H}_{\text{at}} \sim mc^2 \alpha_{\text{em}}^3$, этот парамагнитный вклад имеет порядок

$$\epsilon_2 \sim mc^2 \alpha_{\text{em}}^2 \frac{\mathcal{H}^2}{\mathcal{H}_{\text{at}}^2} \gg V_d \sim mc^2 \alpha_{\text{em}}^4 \frac{\mathcal{H}^2}{\mathcal{H}_{\text{at}}^2},$$

т.е. он в $\alpha_{\text{em}}^2 \sim 10^{-4}$ раз больше диамагнитной энергии.

Таким образом, атомы с термом $J = 0$, но с $L = S \neq 0$ и оболочкой, заполненной менее, чем на половину, в слабом магнитном поле проявляют свойства парамагнетика.

10.5. Эффект Пашена–Бака

Нормальный эффект Зеемана или эффект Пашена–Бака наблюдается в сильных магнитных полях, если спин-орбитальное взаимодействие в атоме подавлено. Понятие сильного магнитного поля задается масштабом $\mathcal{H} \sim \alpha_{\text{em}} \mathcal{H}_{\text{at}} \sim 10^5 \text{ Гс} = 10 \text{ Тесла}$. Такие поля являются рекордными для соленоидов из сверхпроводящих материалов, поэтому на практике в большинстве атомов в сильных полях не удается получить ситуацию, когда взаимодействие магнитного момента электронов с магнитным полем доминирует над спин-орбитальным потенциалом, что осложняет расчеты и делает их громоздкими. Однако в некоторых случаях спин-орбитальное взаимодействие оказывается подавлено в некоторых конфигурациях, и

тогда им можно пренебречь. В этом случае описание эффекта Пашена–Бака становится элементарным.

В самом деле, отсутствие пренебрежимо малого спин-орбитального взаимодействия означает, что волновые функции ведущего приближения — термы ^{2S+1}L , а среднее от возмущения для этих состояний легко вычисляется

$$\langle L, M'; S, M'_S | \mu_0 \mathcal{H} (L_z + 2S_z) | L, M; S, M_S \rangle = \hbar \Omega (M + 2M_S) \delta_{MM'} \delta_{M_S M'_S}. \quad (10.18)$$

Расщепление терма снимается лишь частично: остается комбинаторика перестановок значения проекций орбитального момента и полного спина при заданном значении $M + 2M_S$. При этом, как и при аномальном эффекте Зеемана, спектр расщеплений является эквидистантным с инкрементом, который отличается от случая аномального эффекта Зеемана отсутствием фактора Ланде. Невырожденными являются, очевидно, низшее и высшее состояния.

Тема 8

Спонтанное излучение

Лекция № 11

Квантовые переходы между уровнями атома в ведущем приближении, электрический диполь и квантованное электромагнитное поле, вид возмущения, задача о распаде $2p$ -уровня атома водорода в основное состояние, матричный элемент перехода в нестационарной теории возмущений, усреднение по поляризациям начального состояния атома, время жизни, интенсивность излучения, дипольная формула и принцип соответствия, характерные частоты, ширины и времена жизни, сумма по поляризациям фотона, угловое распределение спонтанного излучения в дипольном приближении, правила отбора по полному моменту, спину, орбитальному моменту и четности в общем случае, серии Лаймана и Бальмера в атоме водорода, индуцированное излучение и поглощение атомом в когерентном электромагнитном поле, интенсивность вынужденного излучения и ее пропорциональность числу квантов поля.

Рассмотрим взаимодействие атома с квантованным электромагнитным полем, т.е. учтем квантовое излучение зарядов, которые движутся нерелятивистским образом, что заведомо имеет место для электронов в атоме из верхней части периодической таблицы химических элементов Д.И.Менделеева. В отличие от классического описания в квантовой механике состояния электронов в атоме лежат в области дискретных значений энергии. Поэтому излучение электромагнитного поля соответствует переходам между уровнями квантовой системы заряженных частиц.

11.1. Дипольное приближение

Прежде всего запишем гамильтониан взаимодействия нерелятивистских электронов и ядра с внешним полем, как это делается в классической электродинамике. Поскольку система является нейтральной, вклад в потенциальную энергию полного заряда системы равен нулю, и в первом приближении

$$V_{E1} = -\mathbf{d} \cdot \mathcal{E}(t), \quad (11.1)$$

где $\mathbf{d} = e \sum_f \mathbf{r}_f$ — дипольный момент атома в системе отсчета с центром в точке, где покоится неподвижное ядро: сумма берется по электронам атома, а электрическое поле в центре системы $\mathbf{r} = 0$ в момент времени t . Последующие члены высших порядков включают в себя энергию квадруполь (E2) и других 2^ℓ -польных электрических моментов ($E\ell$), а также магнитный момент (M1) и высшие магнитные мультиполи.

Условие применимости дипольного приближения заведомо выполнены, если длина волны излучения много больше атомного размера $\lambda \gg a$. Кроме того, поскольку электроны движутся нерелятивистски, смещение зарядов за период излучения всегда много меньше длины волны, так что дипольное приближение вполне законно, а высшие мультиполи подавлены, если только вклад электрического диполя в матричный элемент перехода не равен нулю (см. правила отбора ниже).

Для квантованного электромагнитного поля необходимо записать электрическое поле во вторично квантованном виде

$$\mathcal{E}(x) = -\partial_0 \mathcal{A}(x) = \int \frac{d^3 \mathbf{k}}{2k_0 (2\pi)^3} i k_0 \left\{ e^{-i \mathbf{k} \cdot x} \boldsymbol{\epsilon}_\lambda(\mathbf{k}) \mathbf{a}_\lambda(\mathbf{k}) - e^{i \mathbf{k} \cdot x} \boldsymbol{\epsilon}_\lambda^*(\mathbf{k}) \mathbf{a}_\lambda^\dagger(\mathbf{k}) \right\},$$

так что

$$\mathcal{E}(t) = i \int \frac{d^3 \mathbf{k}}{2(2\pi)^3} \left\{ e^{-i \omega t} \boldsymbol{\epsilon}_\lambda(\mathbf{k}) \mathbf{a}_\lambda(\mathbf{k}) - e^{i \omega t} \boldsymbol{\epsilon}_\lambda^*(\mathbf{k}) \mathbf{a}_\lambda^\dagger(\mathbf{k}) \right\},$$

где операторы рождения и уничтожения нормированы условием

$$[\mathbf{a}_\lambda(\mathbf{k}), \mathbf{a}_{\lambda'}^\dagger(\mathbf{k}')] = 2\hbar\omega(2\pi)^3 \delta_{\lambda\lambda'} \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}'),$$

и возмущение за счет дипольного взаимодействия принимает вид

$$\hat{V}_{E1}(t) = -i \int \frac{d^3 \mathbf{k}}{2(2\pi)^3} \left\{ e^{-i \omega t} \mathbf{d} \cdot \boldsymbol{\epsilon}_\lambda(\mathbf{k}) \mathbf{a}_\lambda(\mathbf{k}) - e^{i \omega t} \mathbf{d} \cdot \boldsymbol{\epsilon}_\lambda^*(\mathbf{k}) \mathbf{a}_\lambda^\dagger(\mathbf{k}) \right\}. \quad (11.2)$$

11.1.1. E1-переход $2p \rightarrow 1s$ в атоме водорода

Вычислим матричный элемент перехода атома водорода из состояния $2p$ в состояние $1s$ за счет дипольного излучения кванта электромагнитного поля в рамках формализма нестационарной теории возмущений. Поскольку спин электрона коммутирует с оператором возмущения для простоты опустим его из внимания в этом параграфе.

Начальное состояние квантовой системы — атом водорода в состоянии $2p$ с проекцией орбитального момента m и вакуум в фоковском пространстве для фотонов

$$|i\rangle = |\text{vac}\rangle |2p, m\rangle \mapsto \langle \mathbf{r} | i \rangle = |\text{vac}\rangle \psi_{2p,m}(\mathbf{r}) = |\text{vac}\rangle R_{2p}(r) Y_{1,m}(\theta, \phi).$$

Угловую часть волновой функции, как мы выяснили в лекции №2, можно записать в векторном виде

$$Y_{1,\alpha}(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} n_\alpha,$$

где \mathbf{n} — единичный радиус-вектор.

Конечное состояние квантовой системы включает в себя $1s$ -уровень атома водорода и один квант электромагнитного поля с волновым вектором \mathbf{k}_f и поляризацией λ_f :

$$|f\rangle = |\mathbf{k}_f, \lambda_f\rangle |1s\rangle \mapsto \langle \mathbf{r} | f \rangle = |\mathbf{k}_f, \lambda_f\rangle \frac{1}{\sqrt{4\pi}} R_{1s}(r).$$

Матричный элемент перехода в первом порядке нестационарной теории возмущений

$$A_{fi} = -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i \omega_{fi} t} \langle f | \hat{V}_{E1}(t) | i \rangle,$$

где

$$\omega_{fi} = \frac{1}{\hbar} \{E_{1s} - E_{2p}\} < 0,$$

после подстановки дипольного взаимодействия, начального и конечного состояний принимает факторизованный вид

$$A_{fi} = \frac{1}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i(\omega_{fi} + \omega_f)t} \int \frac{d^3\mathbf{k}}{2(2\pi)^3} \epsilon_{\lambda}^{*\beta}(\mathbf{k}) \langle \mathbf{k}_f, \lambda_f | \mathbf{a}_{\lambda}^{\dagger}(\mathbf{k}) | \text{vac} \rangle \times \int d^3\mathbf{r} \frac{1}{\sqrt{4\pi}} R_{1s}(r) R_{2p}(r) Y_{1,\alpha}(\theta, \phi) \mathbf{d}^{\beta}. \quad (11.3)$$

Здесь последний интеграл есть матричный элемент оператора электрического дипольного момента электрона $\mathbf{d} = e \mathbf{r} = e r \mathbf{n}$:

$$\langle 1s | \mathbf{d}^{\beta} | 2p, \alpha \rangle = e \frac{\sqrt{3}}{4\pi} \int d^2\Omega n^{\alpha} n^{\beta} \int_0^{\infty} dr \cdot r^2 R_{1s}(r) R_{2p}(r) r. \quad (11.4)$$

Усреднение на сфере выполняется элементарно

$$\frac{1}{4\pi} \int d^2\Omega n^{\alpha} n^{\beta} = \frac{1}{3} \delta^{\alpha\beta},$$

а интеграл по радиусу вычисляется довольно просто, если подставить известные выражения для радиальных волновых функций в атоме водорода

$$R_{1s}(r) = \frac{2}{\sqrt{a^3}} e^{-r/a}, \quad R_{2p}(r) = \frac{1}{2\sqrt{6}a^{5/2}} r e^{-r/2a},$$

откуда

$$r_{fi} = \int_0^{\infty} dr \cdot r^2 R_{1s}(r) R_{2p}(r) r = \frac{a}{\sqrt{6}} \int_0^{\infty} dx \cdot x^4 e^{-3x/2} = a \left(\frac{2}{3} \right)^5 \frac{4!}{\sqrt{6}} = a \sqrt{\frac{2}{3}} \cdot \frac{2^7}{3^4}.$$

В итоге, матричный элемент диполя

$$\langle 1s | \mathbf{d}^{\beta} | 2p, \alpha \rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} \delta^{\alpha\beta} e r_{fi}. \quad (11.5)$$

Матричный элемент в фоковском пространстве —

$$\langle \mathbf{k}_f, \lambda_f | \mathbf{a}_{\lambda}^{\dagger}(\mathbf{k}) | \text{vac} \rangle = 2 \hbar \omega_f (2\pi)^3 \delta_{\lambda_f \lambda} \delta(\mathbf{k}_f - \mathbf{k}).$$

Поэтому интеграл по волновому вектору “снимается” дельта-функцией

$$\int \frac{d^3\mathbf{k}}{2(2\pi)^3} \epsilon_{\lambda}^{*\beta}(\mathbf{k}) \langle \mathbf{k}_f, \lambda_f | \mathbf{a}_{\lambda}^{\dagger}(\mathbf{k}) | \text{vac} \rangle = \hbar \omega_f \epsilon_{\lambda_f}^{*\beta}(\mathbf{k}_f). \quad (11.6)$$

Значит, матричный элемент

$$A_{fi} = 2\pi \delta(\omega_{fi} + \omega_f) \frac{e r_{fi}}{\sqrt{3}} \omega_f \epsilon_{\lambda_f}^{*\alpha}(\mathbf{k}_f). \quad (11.7)$$

Значение матричного элемента, как видим, зависит от проекции вектора поляризации фотона на направление вектора поляризации $2p$ состояния: в амплитуде перехода стоит компонента вектора поляризации фотона, соответствующая поляризации исходного состояния.

Поэтому угловые распределения и модуль амплитуды определяются скалярным произведением поляризаций начального и конечных состояний. Для упрощения оценок в дальнейшем проведем расчет вероятности распада, усредненной по поляризации исходного состояния атома водорода в состоянии $2p$, т.е. проведем суммирование по проекции орбитального момента и разделим на число таких состояний $2l + 1 = 3$.

При возведении амплитуды перехода в квадрат возникает знакомое нам выражение

$$2\pi \delta(\omega) \Big|_{\omega \rightarrow 0} \mapsto T,$$

где $T \rightarrow \infty$ — время наблюдения за системой. Поскольку фотонное состояние находится в непрерывном спектре, квадрирование амплитуды дает плотность вероятности перехода в единицу времени

$$dw_{fi} = \frac{1}{2l+1} \frac{|A_{fi}|^2}{T} \frac{d^3 \mathbf{k}_f}{2\hbar\omega_f(2\pi)^3} = 2\pi \delta(\omega_{fi} + \omega_f) \frac{e^2 r_{fi}^2}{9} \omega_f^2 \frac{d^3 \mathbf{k}_f}{2\hbar\omega_f(2\pi)^3}, \quad (11.8)$$

где мы учли, что вектор поляризации нормирован на единицу: $\boldsymbol{\epsilon}^* \cdot \boldsymbol{\epsilon} = 1$, если провести суммирование по всем проекциям орбитального момента в состоянии $2p$. Интегральная вероятность в единицу времени или обратное время жизни уровня вычисляется как

$$\frac{1}{\tau} = \int dw_{fi},$$

так что с учетом $|\mathbf{k}_f| = \omega_f/c$

$$d^3 \mathbf{k}_f = \frac{1}{c^3} d^2 \Omega \cdot \omega_f^2 d\omega_f,$$

легко находим

$$\frac{1}{\tau} = \frac{2}{3c^3} \omega_f^4 d_{fi}^2 \frac{1}{\hbar\omega_f}, \quad (11.9)$$

где

$$d_{fi} = \frac{e}{\sqrt{4\pi}} \frac{r_{fi}}{\sqrt{3}}$$

есть усредненный по поляризации начального состояния атома матричный элемент модуля электрического дипольного момента электрона, если учесть, что мы проводили расчеты в системе Хэвисайда, в которой $e = e_0 \sqrt{4\pi}$, где e_0 — заряд электрона в системе СГСЭ.

Интенсивность излучения фотона с заданной поляризацией определяется как произведение энергии кванта на вероятность излучения в единицу времени:

$$\mathcal{I}_{\text{pol.}}(\omega_f) = \frac{\hbar\omega_f}{\tau} = \frac{2}{3c^3} \omega_f^4 d_{fi}^2, \quad (11.10)$$

где, очевидно, $\omega_f^2 d_{fi}^2$ отвечает второй производной по времени дипольного момента в частотном представлении, так что воспроизводится классическая формула для интенсивности излучения электрического диполя, но на месте модуля диполя стоит его матричный элемент перехода.

Полученная выше интенсивность выведена для фотона с заданной поляризацией, так что полная интенсивность распада получается суммированием по количеству поляризаций фотона, т.е. умножением выражения (11.10) на фактор 2,

$$\mathcal{I}(\omega_f) = \frac{4}{3c^3} \omega_f^4 d_{fi}^2. \quad (11.11)$$

Кажущееся “удвоение” классического результата обусловлено переходом от диполя как функции времени к спектральному представлению: если $f(t)$ — вещественная моногармоническая функция времени,

$$f(t) = f_{\omega} e^{-i\omega t} + f_{-\omega} e^{i\omega t}, \quad f_{-\omega} = f_{\omega}^*,$$

то усреднение квадрата функции

$$f^2(t) = 2f_{\omega}f_{-\omega} + f_{\omega}^2 e^{-2i\omega t} + f_{-\omega}^2 e^{2i\omega t}$$

по достаточно длительному по сравнению с периодом интервалу времени приводит к константному вкладу

$$\langle f^2(t) \rangle = 2|f_{\omega}|^2,$$

что, как раз, и имеет место при рассмотрении квантового перехода в дипольном приближении, где

$$\ddot{\mathbf{d}}^2(t) \mapsto 2|-\omega_{\text{fi}}^2 d_{\text{fi}}|^2.$$

Оценим полную ширину $2p$ -уровня

$$\Gamma = \frac{\hbar}{\tau} = \frac{4}{3c^3} \omega_{\text{fi}}^3 d_{\text{fi}}^2. \quad (11.12)$$

С учетом значения $\hbar = 6.58 \cdot 10^{-16}$ эВ·с, по порядку величины частоты перехода

$$\omega_{\text{fi}} \sim \frac{1}{\hbar} mc^2 \alpha_{\text{em}}^2 \sim 10^{16} \text{ с}^{-1}, \quad \hbar \omega_{\text{fi}} \sim 25 \text{ эВ},$$

дипольный момент

$$d_{\text{fi}} \sim e_0 a \sim \frac{e_0 \hbar}{mc \alpha_{\text{em}}},$$

так что полная ширина перехода

$$\Gamma \sim mc^2 \alpha_{\text{em}}^5 \ll V_{sl} \sim mc^2 \alpha_{\text{em}}^4, \quad (11.13)$$

т.е. ширина на два порядка ($\alpha_{\text{em}} \approx 1/137$) меньше спин-орбитального расщепления уровней в атоме.

Численно

$$\Gamma \approx 1.2 \cdot 10^{-6} \text{ эВ}, \quad \tau \approx 5.3 \cdot 10^{-10} \text{ с}. \quad (11.14)$$

Таким образом, мы показали, что спонтанное излучение приводит к метастабильности возбужденных уровней в атоме водорода, и сделали оценку характерного времени жизни на примере $2p$ -уровня. Конечно, переходы со спонтанным излучением фотонов происходят не только вследствие дипольного взаимодействия, но и с учетом других электрических и магнитных мультиполей.

11.2. Дипольные переходы в атомах: правила отбора

Поскольку, как мы видели, ширины переходов между атомными уровнями со спонтанным излучением фотонов на пару порядков меньше спин-орбитального расщепления, матричные элементы таких переходов следует вычислять по состояниям термов $^{2S+1}L_J$. Поэтому начальное и конечное состояния атома —

$$|i_{\text{at}}\rangle = |L, S; J, M_J\rangle, \quad |f_{\text{at}}\rangle = |L', S'; J', M'_J\rangle,$$

а начальное и конечные состояния в фоковском пространстве для фотонов остаются такими же, как и в рассмотренном нами примере для перехода $2p \rightarrow 1s$ в атоме водорода.

Отсюда совершенно аналогично с предыдущим параграфом находим

$$A_{fi} = 2\pi \delta(\omega_{fi} + \omega_f) \omega_f \epsilon_{\lambda_f}^{*\alpha}(\mathbf{k}_f) \langle f_{\text{at}} | \mathbf{d}^\alpha | i_{\text{at}} \rangle. \quad (11.15)$$

Введем матричный элемент дипольного момента

$$\mathbf{d}_{fi}^\alpha = \langle f_{\text{at}} | \mathbf{d}^\alpha | i_{\text{at}} \rangle.$$

Тогда дифференциальная вероятность перехода в единицу времени

$$dw_{fi} = \frac{|A_{fi}|^2}{T} \frac{d^3\mathbf{k}_f}{2\hbar\omega_f(2\pi)^3} = 2\pi \delta(\omega_{fi} + \omega_f) \omega_f^2 \frac{d^3\mathbf{k}_f}{2\hbar\omega_f(2\pi)^3} \epsilon_{\lambda_f}^{*\alpha} \epsilon_{\lambda_f}^\beta \mathbf{d}_{fi}^\alpha \mathbf{d}_{fi}^{*\beta}.$$

Проведем суммирование по поляризациям фотона в конечном состоянии

$$\sum_{\lambda_f} \epsilon_{\lambda_f}^{*\alpha} \epsilon_{\lambda_f}^\beta = \delta^{\alpha\beta} - n_f^\alpha n_f^\beta, \quad (11.16)$$

где единичный вектор $\mathbf{n}_f = \mathbf{k}_f/k_f$ направлен по волновому вектору фотона. Тогда

$$\sum_{\lambda_f} \epsilon_{\lambda_f}^{*\alpha} \epsilon_{\lambda_f}^\beta \mathbf{d}_{fi}^\alpha \mathbf{d}_{fi}^{*\beta} = \mathbf{d}_{fi} \cdot \mathbf{d}_{fi}^* - (\mathbf{d}_{fi} \cdot \mathbf{n}_f) (\mathbf{d}_{fi} \cdot \mathbf{n}_f)^* = (\mathbf{d}_{fi} \times \mathbf{n}_f) (\mathbf{d}_{fi} \times \mathbf{n}_f)^* = |\mathbf{d}_{fi}|^2 \sin^2 \theta. \quad (11.17)$$

Значит, интегрирование по телесному углу и частоте

$$d^3\mathbf{k}_f = \frac{1}{c^3} d^2\Omega \cdot \omega_f^2 d\omega_f, \quad d^2\Omega = d\cos\theta d\phi \quad \int_{-1}^1 d\cos\theta \cdot \sin^2\theta = \frac{8}{3},$$

элементарно приводит к вероятности распада в единицу времени

$$\frac{1}{\tau} = \frac{4}{3c^3} \omega_{fi}^4 \frac{|\mathbf{d}_{fi}|^2}{4\pi} \frac{1}{\hbar\omega_{fi}}. \quad (11.18)$$

Переходя к единицам СГСЭ согласно

$$\frac{|\mathbf{d}_{fi}|^2}{4\pi} = |\tilde{\mathbf{d}}_{fi}|^2,$$

приходим к стандартной формуле для обратного времени распада за счет электрического дипольного взаимодействия

$$\frac{1}{\tau} = \frac{4}{3c^3} \omega_{fi}^4 |\tilde{\mathbf{d}}_{fi}|^2 \frac{1}{\hbar\omega_{fi}}, \quad (11.19)$$

и его интенсивности

$$\mathcal{I}(\omega_{\text{fi}}) = \frac{4}{3c^3} \omega_{\text{fi}}^4 |\tilde{d}_{\text{fi}}|^2. \quad (11.20)$$

Правила отбора для дипольного момента определяются тремя фактами. Во-первых, согласно теореме Вигнера–Эккарта матричный элемент векторного оператора дипольного момента не равен нулю только в случае, если

$$|\Delta M_J| \leq 1, \quad |\Delta J| \leq 1, \quad 1 \leq J + J'. \quad (11.21)$$

Отсюда специально отмечаем **правило запрета** для переходов $0 \rightarrow 0'$: матричные элементы с $J = J' = 0$ тождественно равны нулю.

Во-вторых, оператор полного спина электронов коммутирует с дипольным моментом

$$[S_\alpha, d_\beta] = 0, \quad [\mathbf{S}^2, d_\alpha] = 0,$$

так что, взяв от этих коммутаторов матричный элемент по начальному и конечному состояниям атома, например,

$$\langle L', S'; J', M'_J | [\mathbf{S}^2, d_\alpha] | L, S; J, M_J \rangle = \{S'(S' + 1) - S(S + 1)\} \langle L', S'; J', M'_J | d_\alpha | L, S; J, M_J \rangle = 0,$$

заключаем, что, если

$$\Delta S \neq 0, \quad \Delta M_S \neq 0,$$

то матричный элемент дипольного момента обращается в нуль. Значит, правило отбора по полному спину имеет вид

$$\Delta S = 0. \quad (11.22)$$

Из этого факта диагональности матричного элемента по полному спину и независимости от значения спина, сразу следует, что правила отбора по суммарному орбитальному моменту повторяют правила отбора по полному моменту

$$|\Delta M| \leq 1, \quad |\Delta L| \leq 1, \quad 1 \leq L + L', \quad (11.23)$$

и, как следствие, правило запрета переходов с $L = L' = 0$.

Наконец, в-третьих, гамильтониан атома, свободных фотонов и их взаимодействия сохраняет пространственную четность¹. Следовательно, матричный элемент перехода отличен от нуля, если только он является пространственно четной величиной. Другими словами, четности начального и конечного состояний должны совпадать.

Вектор поляризации фотона является пространственно нечетной величиной: он меняет свой знак при полном зеркальном отражении пространства. Значит, пространственная четность фотона отрицательна. Отрицательной является и четность однофотонного состояния в конечном состоянии. Поскольку четность состояния определяется произведением четностей атома и фотона, отсюда следует, что состояния атома в начальном и конечном состояниях отличаются пространственной четностью, т.е. правило отбора по четности гласит, что

$$P_{\text{f}} = -P_{\text{i}}. \quad (11.24)$$

Значение четности состояния атома определяется конфигурацией:

$$P = \prod_k (-1)^{l_k} = (-1)^{\sum l_k},$$

¹Учет слабых взаимодействий приводит к переходам с нарушением пространственной четности.

где l_k — орбитальные моменты электронов в самосогласованном поле.

Обычно это правило отбора по четности конфигурации выводят из того факта, что дипольный момент является вектором, а значит, его перестановочное соотношение с оператором пространственной инверсии \hat{I} имеет вид

$$\hat{I} \mathbf{d} = -\mathbf{d} \hat{I}. \quad (11.25)$$

Возьмем матричный элемент этого операторного равенства по конечному и начальному состояниям атома $\langle f_{\text{at}} | \bullet | i_{\text{at}} \rangle$ и учтем, что эти состояния, отвечающие заданным электронным конфигурациям, являются собственными для эрмитова оператора инверсии,

$$\hat{I} | i_{\text{at}} \rangle = P_i | i_{\text{at}} \rangle, \quad \langle f_{\text{at}} | \hat{I} = \langle f_{\text{at}} | P_f,$$

так что

$$P_f \langle f_{\text{at}} | \mathbf{d} | i_{\text{at}} \rangle = -P_i \langle f_{\text{at}} | \mathbf{d} | i_{\text{at}} \rangle. \quad (11.26)$$

Значит, матричный элемент дипольного момента не равен нулю, если только

$$P_f = -P_i, \quad (11.27)$$

т.е. пространственные четности начального и конечного состояний имеют противоположные знаки.

Итак, мы установили основные характеристики спонтанного излучения атомов в дипольном приближении E1, которое приводит к метастабильности возбужденных уровней атома. Эта метастабильность наблюдается в виде спектральных линий излучения атомов. Например, в простейшем случае атома водорода переходы возбужденных состояний на основной уровень соответствуют серии Лаймана в ультрафиолетовом диапазоне частот с $\lambda \leq 1500$ Ангстрем ($1\text{\AA} = 10^{-8}$ см), а на уровень с главным квантовым числом $n = 2$ — серии Бальмера, которая находится в видимой части спектра $\lambda \sim 4500 - 7500$ \AA.

11.3. Индуцированное излучение и поглощение когерентного поля

Если квантованное электромагнитное поле находится в когерентном состоянии, отличном от вакуума, то имеет место индуцированное поглощение и излучение квантов поля атомом при переходах между термами, которое легко вычислить, используя результаты двух предыдущих параграфов.

В самом деле, вместо матричного элемента

$$\langle \mathbf{k}_f, \lambda_f | \mathbf{a}_\lambda^\dagger(\mathbf{k}) | \text{vac} \rangle = 2 \hbar \omega_f (2\pi)^3 \delta_{\lambda_f \lambda} \delta(\mathbf{k}_f - \mathbf{k})$$

в фоковском пространстве для когерентного состояния фотонов $|\alpha_{\lambda_\omega}(\mathbf{k}_\omega)\rangle$ с импульсом \mathbf{k}_ω и поляризацией λ_ω

$$\mathbf{a}_{\lambda_\omega}(\mathbf{k}_\omega) |\alpha_{\lambda_\omega}(\mathbf{k}_\omega)\rangle = \alpha_{\lambda_\omega}(\mathbf{k}_\omega) |\alpha_{\lambda_\omega}(\mathbf{k}_\omega)\rangle, \quad (11.28)$$

в случае излучения следует взять

$$\langle \alpha_{\lambda_\omega}(\mathbf{k}_\omega) | \mathbf{a}_\lambda^\dagger(\mathbf{k}) | \alpha_{\lambda_\omega}(\mathbf{k}_\omega) \rangle = \alpha_{\lambda_\omega}^*(\mathbf{k}_\omega) 2 \hbar \omega (2\pi)^3 \delta_{\lambda_\omega \lambda} \delta(\mathbf{k}_\omega - \mathbf{k}), \quad (11.29)$$

или

$$\langle \alpha_{\lambda_\omega}(\mathbf{k}_\omega) | \mathbf{a}_\lambda(\mathbf{k}) | \alpha_{\lambda_\omega}(\mathbf{k}_\omega) \rangle = \alpha_{\lambda_\omega}(\mathbf{k}_\omega) 2 \hbar \omega (2\pi)^3 \delta_{\lambda_\omega \lambda} \delta(\mathbf{k}_\omega - \mathbf{k}) \quad (11.30)$$

в случае поглощения. В результате, в выражении для вероятности и интенсивности индуцированного излучения появляется дополнительный фактор

$$|\alpha_{\lambda\omega}(\mathbf{k}_\omega)|^2 = \langle N_{\lambda\omega}(\mathbf{k}_\omega) \rangle, \quad (11.31)$$

т.е. среднее число фотонов в когерентном состоянии, которое определяет интенсивность электромагнитного поля: плотность потока энергии $S \sim \langle N_{\lambda\omega}(\mathbf{k}_\omega) \rangle$. Это утверждение справедливо и для вынужденного поглощения, вероятность которого, согласно общим свойствам, и из явного вида формул, совпадает с вероятностью вынужденного излучения. В дипольном приближении после суммирования по поляризациям для вероятности индуцированного поглощения и излучения в единицу времени находим

$$\frac{1}{\tau_{\text{ind.}}} = \langle N(\mathbf{k}_{\text{fi}}) \rangle \frac{4}{3c^3} \omega_{\text{fi}}^4 |\tilde{\mathbf{d}}_{\text{fi}}|^2 \frac{1}{\hbar\omega_{\text{fi}}}, \quad (11.32)$$

а для интенсивности

$$J_{\text{ind.}}(\omega_{\text{fi}}) = \langle N(\mathbf{k}_{\text{fi}}) \rangle \frac{4}{3c^3} \omega_{\text{fi}}^4 |\tilde{\mathbf{d}}_{\text{fi}}|^2. \quad (11.33)$$

Подчеркнем, что интенсивность вынужденного излучения пропорциональна интенсивности электромагнитного излучения, которое индуцирует это излучение, что контрастирует со спонтанным излучением, которое не зависит от интенсивности внешнего поля. В итоге, вероятность излучения оказывается больше вероятности поглощения за счет вклада спонтанного излучения.

Описанное явление индуцированного излучения когерентным электромагнитным полем лежит в основе действия лазеров — усилителей когерентного электромагнитного излучения за счет переходов из возбужденных метастабильных состояний, количество которых увеличивают за счет механизма “накачки”: сначала импульсом энергии переводят атомы в возбужденное состояние, которое быстро спонтанно распадается в долгоживущее метастабильное состояние, редкий спонтанный распад которого дает затравочное когерентное состояние поля, индуцирующее переход других таких состояний.

Наконец, произвольное поле можно представить в виде суперпозиции когерентных состояний, так что задачу вынужденного излучения и поглощения можно считать решенной и в общем случае.

Тема 9

Рассеяние

Лекция № 12

Асимптотические состояния в задаче рассеяния, S -матрица и определение дифференциального сечения рассеяния, предельное значение оператора эволюции на больших временах и функция Грина стационарного уравнения Шредингера, контур интегрирования, запаздывающая функция Грина, разложение функции Грина по базису стационарных состояний, функция Грина свободной частицы, интегральные уравнения для функции Грина стационарного уравнения Шредингера, запаздывающей функции Грина и волновой функции в задаче рассеяния, волновая функция как решение стационарной задачи с источником, асимптотическое поведение на больших расстояниях, падающий и рассеянный потоки вероятности, амплитуда рассеяния $f(\theta)$ и формула для дифференциального сечения, T -матрица рассеяния, тождество унитарности для матрицы рассеяния и оптическая теорема, интегральное уравнение для T -матрицы, амплитуда рассеяния в борновском приближении и условие его применимости для медленных и быстрых частиц.

12.1. Асимптотические состояния и S -матрица

Пусть в задаче о рассеянии мишень, помещенная в центр координат, создает сферически симметричный потенциал $V(r)$, который обращается в нуль на бесконечности¹, и в начальный момент времени $t' \rightarrow -\infty$ вдали от мишени частица находится в состоянии $|i(t')\rangle$, отвечающем свободной волне де Бройля с волновым вектором \mathbf{k}_i , направленным к мишени, т.е.

$$\psi_i^{(0)}(t', \mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} | i \rangle = e^{i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}} \cdot e^{-\frac{i}{\hbar} E_i t'}. \quad (12.1)$$

Поскольку такое состояние не является решением стационарного уравнения Шредингера с гамильтонианом

$$\hat{H} = H^{(0)} + V(r), \quad H^{(0)} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m},$$

оно может служить лишь асимптотическим приближением для точного решения в ограниченной области, а именно, вдали от мишени, где потенциалом можно пренебречь, если радиус его действия ограничен. Поэтому говорят, что такие *начальные состояния образуют пространство асимптотических in-состояний*. Обычно полагают, что in-состояния можно представить в виде волнового пакета достаточно большого размера далеко от мишени в малом, но макроскопическом телесном угле в направлении $-\mathbf{n}_i$, где $\mathbf{n}_i = \mathbf{k}_i/k_i$ — единичный волновой вектор исходного состояния, так что отличием этих состояний от волн де Бройля можно пренебречь.

¹Задача о разделении движения центра масс и относительного движения двух тел решается стандартным образом, поэтому мы сразу полагаем, что мишень покоится, а частица, рассеивающаяся на ней, имеет массу, равную приведенной массе в нерелятивистской задаче двух тел.

Для консервативной системы эволюция состояния во времени определяется действием унитарного оператора эволюции

$$U(t'', t') = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} (t'' - t')},$$

так что в момент времени $t'' \rightarrow \infty$ получается состояние

$$|i(t'')\rangle = U(t'', t') |i(t')\rangle.$$

Результат эволюции начального состояния исследуют вдали от мишени, где опять можно пренебречь потенциалом, регистрируя частицы, отвечающие де-бройлевским состояниям $|f(t'')\rangle$ с волновым вектором \mathbf{k}_f , направленным от мишени, т.е.

$$\psi_f^{(0)}(t'', \mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} | f(t'') \rangle = e^{i\mathbf{k}_f \cdot \mathbf{r}} \cdot e^{-\frac{i}{\hbar} E_f t''}.$$

Такие конечные состояния также не могут быть точными решениями стационарного уравнения Шредингера, и их рассматривают как *асимптотические out-состояния*, имеющие область применения, ограниченную малым телесным углом в направлении $\mathbf{n}_f = \mathbf{k}_f/k_f$ вдали от мишени (см. рис. 9.1).

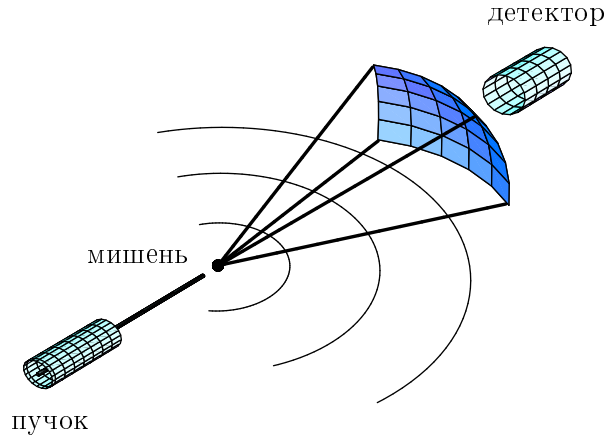


Рис. 9.1: Схема рассеяния пучка на мишени. Идеальный детектор максимально «покрывает» всю 4π -геометрию по телесному углу.

Амплитуду вероятности

$$S_{fi} = \lim_{\substack{t' \rightarrow -\infty \\ t'' \rightarrow +\infty}} \langle f(t'') | U(t'', t') | i(t') \rangle \quad (12.2)$$

называют элементом S -матрицы.

Так как энергия консервативной системы сохраняется, элементы \mathcal{S} -матрицы по состояниям с разной энергией обращаются в нуль и отличны от нуля только при $E_f = E_i$, а значит,

$$\mathcal{S}_{fi} \sim \delta(E_f - E_i).$$

Поэтому квадрат матричного элемента определяет плотность вероятности перехода из начального состояния в конечное, лежащее в непрерывном спектре, в единицу времени, так что

$$dw_{fi} = \frac{|\mathcal{S}_{fi}|^2}{T} \frac{d^3 \mathbf{k}_f}{(2\pi)^3}, \quad T = t'' - t' \rightarrow \infty, \quad T = 2\pi\hbar \delta(E) \Big|_{E \rightarrow 0}.$$

Дифференциальное сечение рассеяния определяют согласно

$$d\sigma = \frac{dw_{fi}}{j_i}, \quad (12.3)$$

где j_i — модуль вектора потока вероятности в начальном состоянии в момент времени $t' \rightarrow -\infty$. Размерности величин в формуле для дифференциального сечения

$$[dw_{fi}] = \frac{1}{[t]}, \quad [j_i] = \frac{1}{[r]^2[t]},$$

так что сечение имеет размерность площади.

Таким образом, решение задачи рассеяния и вычисления сечений сводится к задаче расчета элементов \mathcal{S} -матрицы.

12.2. Функция Грина

Для консервативных систем оператор эволюции при $t \rightarrow +\infty$ можно просто выразить в виде преобразования Фурье для оператора

$$e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} = i \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dE}{2\pi} \frac{e^{-\frac{i}{\hbar} E t}}{E - \hat{H} + i0}, \quad (12.4)$$

где знак бесконечно малой мнимой добавки в знаменателе позволяет, во-первых, замкнуть контур интегрирования в нижней полуплоскости, как это показано на рис. 9.2, поскольку

$$e^{-\epsilon t} \rightarrow 0, \quad t \rightarrow +\infty, \quad \epsilon \rightarrow +0,$$

и интеграл по полуокружности обращается в нуль, а во-вторых, формально вычислить интеграл в теории вычетов с помощью формулы Коши по замкнутому контуру с ориентацией по часовой стрелке:

$$\oint dE \frac{e^{-\frac{i}{\hbar} E t}}{E - \hat{H} + i0} = -2\pi i \cdot e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t}.$$

При $t \rightarrow -\infty$ контур замыкается в верхней полуплоскости, и интегрирование по контуру, не содержащему полюсов, дает нуль.

Оператор

$$G_E = \frac{1}{E - \hat{H} + i0} \quad (12.5)$$

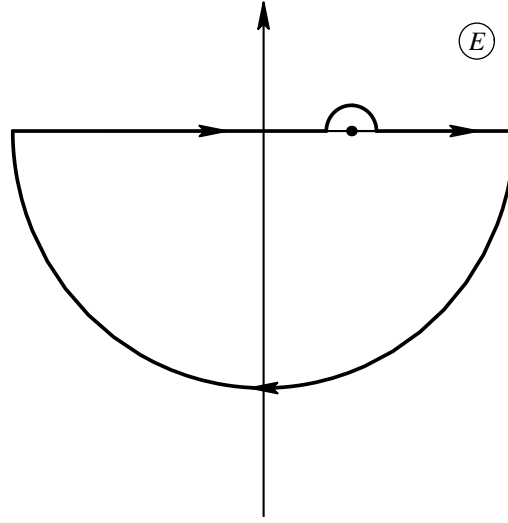


Рис. 9.2: Контур интегрирования в плоскости комплексной энергии E .

называют *резольвентой*. Очевидно, что резольвента удовлетворяет операторному уравнению

$$(E - \hat{H}) G_E = \mathbb{1}, \quad (12.6)$$

и матричный элемент этого уравнения в координатном пространстве $\langle \mathbf{r} | \bullet | \mathbf{r}' \rangle$ легко вычислить, если ввести обозначение для *функции Грина*

$$\mathcal{G}_E(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \langle \mathbf{r} | G_E | \mathbf{r}' \rangle, \quad (12.7)$$

и учесть тождество

$$\langle \mathbf{r} | \mathbb{1} | \mathbf{r}' \rangle = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'),$$

так что

$$(E - \hat{H}_{\mathbf{r}}) \mathcal{G}_E(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (12.8)$$

Таким образом, мы пришли к уравнению для *функции Грина стационарного уравнения Шредингера*.

Матричный элемент оператора эволюции дает *запаздывающую функцию Грина*

$$\mathcal{G}(t'', \mathbf{r}; t', \mathbf{r}') = -\frac{i}{\hbar} \langle \mathbf{r} | U(t'', t') | \mathbf{r}' \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dE}{2\pi\hbar} e^{-\frac{i}{\hbar} E (t'' - t')} \mathcal{G}_E(\mathbf{r}, \mathbf{r}'), \quad (12.9)$$

которая обращается в нуль при $t'' - t' < 0$. Этот факт существенно влияет на то, какому уравнению удовлетворяет запаздывающая функция Грина. Дифференцирование по време-

ни дает

$$\begin{aligned}
 i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \mathcal{G}(t, \mathbf{r}; t', \mathbf{r}') &= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dE}{2\pi\hbar} e^{-\frac{i}{\hbar} E(t-t')} (\hat{H} + E - \hat{H}) \mathcal{G}_E(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \\
 &= \hat{H} \mathcal{G}(t, \mathbf{r}; t', \mathbf{r}') + \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dE}{2\pi\hbar} e^{-\frac{i}{\hbar} E(t-t')} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \\
 &= \hat{H} \mathcal{G}(t, \mathbf{r}; t', \mathbf{r}') + \delta(t - t') \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}').
 \end{aligned}$$

В итоге, используя компактные обозначения $x = (t, \mathbf{r}) \equiv (t, \mathbf{x})$, принятые в пространстве Минковского, находим

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \mathcal{G}(x; x') - \hat{H} \mathcal{G}(x; x') = \delta^{(4)}(x - x'). \quad (12.10)$$

Запаздывающая функция Грина уравнения Шредингера позволяет находить волновую функцию состояния в произвольный момент времени $t > t'$, так как она дает координатное представление для оператора эволюции:

$$\psi(x) = i\hbar \int d^3\mathbf{x}' \mathcal{G}(x; x') \psi(x'). \quad (12.11)$$

Значит, элементы \mathcal{S} -матрицы выражаются через матричные элементы функции Грина по асимптотическим состояниям:

$$\mathcal{S}_{fi} = i\hbar \lim_{\substack{t' \rightarrow -\infty \\ t'' \rightarrow +\infty}} \int d^3\mathbf{x} \psi_f^{*(0)}(x'') \mathcal{G}(x''; x') \psi_i^{(0)}(x'). \quad (12.12)$$

Если известны точные решения стационарного уравнения Шредингера,

$$\hat{H} \psi_n(\mathbf{r}) = E_n \psi_n(\mathbf{r}),$$

образующие базис в гильбертовом пространстве, то, естественно, в силу полноты базиса²

$$\sum_n \langle \mathbf{r} | n \rangle \langle n | \mathbf{r}' \rangle = \sum_n \psi_n(\mathbf{r}) \psi_n^*(\mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'),$$

легко найти и формулу для функции Грина \mathcal{G}_E . В самом деле,

$$\mathcal{G}_E(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \sum_n \langle \mathbf{r} | G_E | n \rangle \langle n | \mathbf{r}' \rangle,$$

и так как

$$G_E | n \rangle = \frac{1}{E - \hat{H} + i0} | n \rangle = \frac{1}{E - E_n + i0} | n \rangle,$$

получаем

$$\mathcal{G}_E(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \sum_n \frac{\psi_n(\mathbf{r}) \psi_n^*(\mathbf{r}')}{E - E_n + i0}. \quad (12.13)$$

²Для простоты записи проводим суммирование по квантовым числам, среди которых могут быть и непрерывные спектральные параметры.

Отсюда методом вычетов находим для запаздывающей функции Грина

$$\mathcal{G}(x''; x') = -\frac{i}{\hbar} \vartheta(t'' - t') \sum_n \psi_n(x'') \psi_n^*(x'), \quad (12.14)$$

где $\vartheta(z)$ — ступенчатая тета-функция Хевисайда.

Однако, как известно, точные решения удается найти редко. Поэтому приходится использовать приближенные методы расчетов. Для этих целей исследуем функцию Грина свободной частицы, решение уравнения Шредингера для которой хорошо известно.

12.3. Функция Грина свободной частицы

Базис стационарных состояний свободной нерелятивистской частицы с гамильтонианом $H^{(0)}$

$$\langle \mathbf{r} | \mathbf{k} \rangle = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}$$

позволяет вычислить функцию Грина $\mathcal{G}_E^{(0)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ по общей формуле, так что

$$\mathcal{G}_E^{(0)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \int \frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \frac{e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')}}{E - E(\mathbf{k}) + i0},$$

где

$$E(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m}.$$

Интегрирование по углам выполняется элементарно

$$\int_0^{2\pi} d\phi \int_{-1}^{+1} d\cos\theta e^{ik\rho \cos\theta} = \frac{2\pi}{ik\rho} \{e^{ik\rho} - e^{-ik\rho}\},$$

где $\rho = |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$. Далее

$$\mathcal{G}_E^{(0)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\frac{i}{4\pi^2\rho} \int_0^\infty k dk \frac{e^{ik\rho} - e^{-ik\rho}}{E - E(\mathbf{k}) + i0} = \frac{im}{4\pi^2\hbar^2\rho} \int_C dk^2 \frac{e^{i\rho\sqrt{k^2}}}{k^2 - k_E^2 - i0},$$

где $k_E^2 = 2mE/\hbar^2$, а интеграл берется по верхнему и нижнему “берегам” разреза в плоскости комплексной переменной k^2 , как это показано на рис. 9.3. При этом $\sqrt{k^2}$ принимает положительные значения на верхнем берегу разреза и отрицательные на нижнем. Контур интегрирования может быть замкнут по окружности на бесконечности, поскольку комплексная фаза квадратного корня на этой окружности имеет положительную чисто мнимую часть, так что экспонента обращается в нуль.

Тогда по формуле Коши для вычетов находим для функции Грина выражение

$$\mathcal{G}_E^{(0)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \frac{e^{ik_E|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}. \quad (12.15)$$

Отметим, что функция Грина свободной нерелятивистской частицы обладает трансляционной инвариантностью: она зависит только от разности векторов $\mathbf{r} - \mathbf{r}' = \boldsymbol{\rho}$.

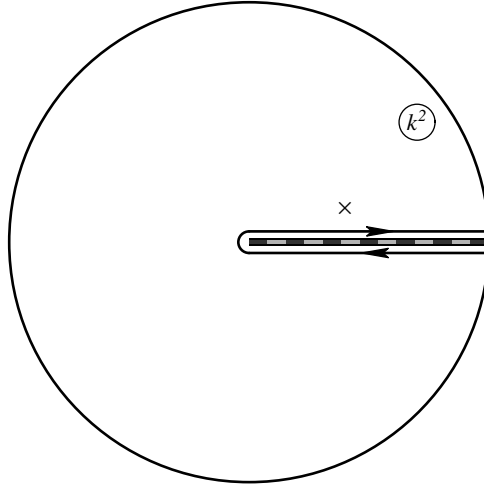


Рис. 9.3: Особенности подынтегрального выражения для функции Грина свободной нерелятивистской частицы в плоскости комплексной переменной $k^2 = 2mE/\hbar^2$ и контур интегрирования.

12.4. Интегральное уравнение

Реперное уравнение для резольвенты свободной частицы

$$\mathbb{1} = G_E^{(0)} (E - H^{(0)}) = G_E^{(0)} (E - \hat{H} + V) \quad (12.16)$$

позволяет установить тождество для функции Грина стационарного уравнения Шредингера с гамильтонианом \hat{H} :

$$G_E = \mathbb{1} \cdot G_E = G_E^{(0)} (E - \hat{H} + V) G_E = G_E^{(0)} (\mathbb{1} + V G_E),$$

т.е.

$$G_E = G_E^{(0)} + G_E^{(0)} V G_E, \quad (12.17)$$

а значит, в координатном представлении это уравнение является интегральным

$$\mathcal{G}_E(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \mathcal{G}_E^{(0)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') + \int \mathcal{G}_E^{(0)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_1) V(\mathbf{r}_1) \mathcal{G}_E(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}') d^3 \mathbf{r}_1. \quad (12.18)$$

Очевидно, что это уравнение для функции Грина можно решать методом итераций, т.е. находить решение с любой точностью по степени потенциала. Такой подход эффективен, если ряд последовательных приближений быстро сходится, и этот метод лежит в основе теории возмущений.

Аналогичную процедуру можно провести и для запаздывающей функции Грина, если ввести состояния $|x\rangle$, нормированные согласно

$$\langle x|x'\rangle = \delta^{(4)}(x - x').$$

Тогда

$$G = G^{(0)} + G^{(0)} V G, \quad (12.19)$$

и в интегральном виде³

$$\mathcal{G}(x, x') = \mathcal{G}^{(0)}(x - x') + \int \mathcal{G}^{(0)}(x - x_1) V(x_1) \mathcal{G}(x_1, x') d^4 x_1. \quad (12.20)$$

Запаздывающая функция Грина переводит начальное состояние в состояние в момент времени $t > t'$, так что

$$\psi_i^{(0)}(x) = i\hbar \int \mathcal{G}^{(0)}(x - x') \psi_i^{(0)}(x') d^3 x',$$

и

$$\psi_i^{(+)}(x) = i\hbar \int \mathcal{G}(x, x') \psi_i^{(0)}(x') d^3 x', \quad (12.21)$$

где, как следует из определения функции Грина, $\psi_i^{(+)}(x)$ — решение уравнения Шредингера при $t > t'$.

Используя пару последних уравнений и интегральное уравнение для запаздывающей функции Грина легко находим интегральное уравнение для запаздывающей волновой функции

$$\psi_i^{(+)}(x) = \psi_i^{(0)}(x) + \int \mathcal{G}^{(0)}(x - x_1) V(x_1) \psi_i^{(+)}(x_1) d^4 x_1. \quad (12.22)$$

В стационарном случае, во-первых, потенциал не зависит от времени $V(x) = V(\mathbf{x})$, а во-вторых, начальное асимптотическое состояние в энергией E_i дает стационарное решение уравнения Шредингера с той же энергией:

$$\psi_i^{(+)}(x) = e^{-\frac{i}{\hbar} E_i t} \psi_i^{(+)}(\mathbf{x}). \quad (12.23)$$

Поэтому интегральное уравнение сводится к виду

$$\begin{aligned} e^{-\frac{i}{\hbar} E_i t} \psi_i^{(+)}(\mathbf{x}) &= e^{-\frac{i}{\hbar} E_i t} \psi_i^{(0)}(\mathbf{x}) + \int \frac{dE dt_1}{2\pi\hbar} e^{-\frac{i}{\hbar} (E_i - E) t_1} e^{-\frac{i}{\hbar} E t} \\ &\times \int \mathcal{G}_E^{(0)}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_1) V(\mathbf{x}_1) \psi_i^{(+)}(\mathbf{x}_1) d^3 \mathbf{x}_1, \end{aligned}$$

или после сокращения временных факторов

$$\psi_i^{(+)}(\mathbf{x}) = \psi_i^{(0)}(\mathbf{x}) + \int \mathcal{G}_E^{(0)}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_1) V(\mathbf{x}_1) \psi_i^{(+)}(\mathbf{x}_1) d^3 \mathbf{x}_1. \quad (12.24)$$

Это — интегральное уравнение⁴ для стационарной волновой функции в задаче рассеяния. Физический смысл этого уравнения становится ясным, если записать стационарное уравнение Шредингера для $\psi_i^{(+)}(\mathbf{x})$:

$$(E - H^{(0)}) \psi_i^{(+)}(\mathbf{x}) = V(\mathbf{x}) \psi_i^{(+)}(\mathbf{x}), \quad (12.25)$$

³В отличие от выражения в виде «тэ-экспоненты» для оператора эволюции, в случае потенциала, зависящего от времени, метод функций Грина приводит к обычным интегральным выражениям. Однако сложности с упорядочиванием по времени проявляют себя и здесь при расчетах петлевых квантовых поправок: возникающие интегралы могут содержать расходимости, методам устранения которых посвящена теория перенормировок, выходящая за рамки данного курса.

⁴Уравнение Липпманна–Швингера.

которое, естественно, следует из интегрального уравнения, так что правую часть можно рассматривать в качестве источника в уравнении Шредингера

$$(E - H^{(0)}) \psi(\mathbf{x}) = j(\mathbf{x}),$$

общее решение которого представляется в виде суммы решения для однородного уравнения без источников, т.е. $\psi_i^{(0)}(\mathbf{x})$, и частного решения

$$\int \mathcal{G}_E^{(0)}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_1) j(\mathbf{x}_1) d^3 \mathbf{x}_1.$$

Тогда подстановка в это соотношение источника $j(\mathbf{x}) = V(\mathbf{x}) \psi_i^{(+)}(\mathbf{x})$ приводит к интегральному уравнению для стационарной волновой функции.

12.5. Асимптотическое поведение на больших расстояниях и формула для сечения

Интегральное уравнение

$$\psi_i^{(+)}(\mathbf{r}) = \psi_i^{(0)}(\mathbf{r}) + \int \mathcal{G}_E^{(0)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') V(\mathbf{r}') \psi_i^{(+)}(\mathbf{r}') d^3 \mathbf{r}' \quad (12.24)$$

позволяет установить асимптотическое поведение волновой функции в задаче рассеяния при $r \rightarrow \infty$. Оставляя вклад *падающей* волны⁵ $\psi_i^{(0)}(\mathbf{r})$, исследуем интегральный член. При $r \rightarrow \infty$ и ограниченном $r' < a$ функция Грина свободной частицы ведет себя как

$$\mathcal{G}_E^{(0)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \frac{e^{i k_E |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \simeq -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \frac{e^{i k_E (r - \mathbf{n} \cdot \mathbf{r}')}}{r} \quad \mathbf{n} = \frac{\mathbf{r}}{r}. \quad (12.26)$$

Поэтому для потенциалов ограниченного радиуса действия или достаточно быстро убывающих с ростом расстояния, асимптотическое поведение волновой функции можно представить в виде

$$\psi_i^{(+)}(\mathbf{r}) \simeq \psi_i^{(0)}(\mathbf{r}) + \frac{e^{i k_i r}}{r} f(\theta), \quad r \rightarrow \infty, \quad (12.27)$$

где

$$f(\theta) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3 \mathbf{r}' e^{-i \mathbf{k}_E \cdot \mathbf{r}'} V(\mathbf{r}') \psi_i^{(+)}(\mathbf{r}'). \quad (12.28)$$

Здесь в силу сохранения энергии⁶ $k_E = k_i$, и $\mathbf{k}_E = \mathbf{n} k_E$. Поскольку скалярная величина f зависит от двух векторов⁷ \mathbf{k}_i и \mathbf{k}_E , она может определяться только скалярными величинами:

⁵Точнее было бы говорить не о падающей волне, а о волне, прошедшей без рассеяния: если потенциал исключить, то эта волна отвечает точному решению уравнения Шредингера, при наличии же потенциала интегральный член соответствует рассеянию, причем в силу сохранения вероятности (нормировки состояния) в члене с рассеянием с необходимостью присутствует волна, рассеянная вперед (с тем же импульсом, что и в начальном состоянии), которая интерферирует с исходной волной, уменьшая ее вклад в нормировку ровно настолько, с какой вероятность происходит рассеяние. О точном математическом выражении этого факта – оптической теореме – речь пойдет ниже.

⁶Потенциал на бесконечности обращается в нуль, так что полная энергия определяется кинетической энергией.

⁷Если потенциал не является центрально симметричным, как, например, в случае потенциала в постоянном электрическом поле $V(\mathbf{r}) = -e(\mathbf{r} \cdot \mathbf{E})$, интеграл зависит от трех векторов.

квадратами векторов и их скалярным произведением $\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{k}_E = k_i^2 \cos \theta$, а значит, f является функцией угла между этими векторами, как мы и записали выше.

Если фиксировать нормировку падающей волны, как мы ее определили при постановке задачи рассеяния, то асимптотический вид волновой функции

$$\psi_i^{(+)}(\mathbf{r}) \simeq e^{i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}} + \frac{e^{ik_i r}}{r} f(\theta), \quad r \rightarrow \infty.$$

Величину $f(\theta)$ часто называют амплитудой рассеяния. Ее можно записать согласно (12.28) в виде

$$f(\theta) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3\mathbf{r}' \psi_n^{(0)}(\mathbf{r}') V(r') \psi_i^{(+)}(\mathbf{r}'), \quad (12.28)$$

где свободная волна

$$\psi_n^{(0)}(\mathbf{r}') = e^{-i\mathbf{k}_E \cdot \mathbf{r}'}.$$

Поток начальной волны $\psi_i^{(0)}(\mathbf{r})$, как известно,

$$\mathbf{j}_{\text{in}} = \frac{\hbar}{m} \mathbf{k}_i.$$

Для расчета потока вероятности

$$\mathbf{j} = -\frac{i\hbar}{2m} \{\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*\}$$

вычислим в асимптотической области $r \rightarrow \infty$ градиент вклада рассеяния. В полярных координатах

$$\nabla = \mathbf{e}_r \frac{\partial}{\partial r} + \mathbf{e}_\theta \frac{\partial}{r \partial \theta} + \mathbf{e}_\phi \frac{\partial}{r \sin \theta \partial \phi}.$$

Поэтому при $r \rightarrow \infty$ угловые компоненты малы как $\mathcal{O}(1/r^2)$, и вклад дает только компонента вдоль радиус-вектора $\mathbf{e}_r = \mathbf{n}$:

$$\nabla \frac{e^{ik_i r}}{r} f(\theta) \simeq i k_i \frac{e^{ik_i r}}{r} f(\theta) \mathbf{n} = i \mathbf{k}_E \frac{e^{ik_i r}}{r} f(\theta).$$

Следовательно, поток вероятности рассеяния

$$\mathbf{j}_{\text{out}} = \frac{\hbar}{m} \mathbf{k}_E \frac{1}{r^2} |f(\theta)|^2 \quad (12.29)$$

зависит от угла рассеяния θ , и он является симметричным по полярному углу ϕ (в случае сферически симметричного потенциала). В асимптотической области в малом телесном угле этот поток можно аппроксимировать плоской волной с волновым вектором $\mathbf{k}_f = \mathbf{n} k_i$ и нормировкой, которая определяет вероятность рассеяния. В самом деле, за счет потока вероятности через площадь на сфере радиуса r в телесном угле $d\Omega$

$$d\mathbf{s} = \mathbf{n} \cdot r^2 d\Omega$$

вероятность рассеяния в единицу времени составляет

$$dw = \mathbf{j}_{\text{out}} \cdot d\mathbf{s} = \frac{\hbar}{m} k_i |f(\theta)|^2 d\Omega. \quad (12.30)$$

Следовательно, дифференциальное сечение рассеяния⁸

$$d\sigma = \frac{dw}{j_{\text{in}}} = |f(\theta)|^2 d\Omega. \quad (12.31)$$

В итоге, мы вывели формулу для дифференциального сечения в терминах амплитуды рассеяния $f(\theta)$.

12.6. \mathcal{T} -матрица, унитарность и оптическая теорема

Матричный элемент \mathcal{S} -матрицы

$$\mathcal{S}_{fi} = \lim_{t \rightarrow +\infty} \langle \psi_f^{(0)}(t) | \psi_i^{(+)}(t) \rangle$$

можно вычислить, подставив выражение для $|\psi_f^{(0)}(t)\rangle$ согласно интегральному уравнению. Тогда

$$\mathcal{S}_{fi} = \langle \psi_f^{(0)} | \psi_i^{(0)} \rangle + \int \psi_f^{*(0)}(x) \mathcal{G}^{(0)}(x - x_1) V(x_1) \psi_i^{(+)}(x_1) d^4x_1 d^3\mathbf{x}. \quad (12.32)$$

Здесь, во-первых,

$$\langle \psi_f^{(0)} | \psi_i^{(0)} \rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} (E_i - E_f) t} \langle \mathbf{k}_f | \mathbf{k}_i \rangle = (2\pi)^3 \delta(\mathbf{k}_f - \mathbf{k}_i).$$

Во-вторых, при $t > t_1$

$$i\hbar \int \psi_f^{*(0)}(x) \mathcal{G}^{(0)}(x - x_1) d^3\mathbf{x} = \int \langle \mathbf{k}_f | \mathbf{k} \rangle \frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \langle \mathbf{k} | \mathbf{x}_1 \rangle e^{\frac{i}{\hbar} (E_i - E) t + \frac{i}{\hbar} E t_1} = \psi_f^{*(0)}(x_1).$$

Это есть функциональное выражение тождества для унитарного оператора эволюции

$$U(t, t') U(t', t) = \mathbb{1} \quad \Rightarrow \quad U(t, t') = U^\dagger(t', t),$$

которое означает, что этот оператор описывает также и эволюцию назад по времени. Поэтому интегральный член в матричном элементе \mathcal{S}_{fi} (12.32) записывается в виде

$$\int \psi_f^{*(0)}(x_1) V(x_1) \psi_i^{(+)}(x_1) d^4x_1.$$

Однако в стационарном случае потенциал не зависит от времени, а волновая функция $\psi_i^{(+)}(x)$ является решением стационарного уравнения Шредингера с энергией начального асимптотического состояния E_i , так что интегрирование по t_1 легко выполняется

$$\int dt_1 e^{\frac{i}{\hbar} (E_f - E_i) t} = 2\pi\hbar \delta(E_f - E_i).$$

⁸Для волн де Бройля мы фиксировали нормировку $\langle \mathbf{k} | \mathbf{k}' \rangle = (2\pi)^3 \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}')$, которая отвечает норме состояния $(2\pi)^3 \delta(\mathbf{k})|_{\mathbf{k} \rightarrow 0} = \mathcal{V}$, где \mathcal{V} — объем пространства. При нормировке состояния на единицу $|\mathbf{k}\rangle \mapsto |\mathbf{k}\rangle/\sqrt{\mathcal{V}}$ плотность потока имеет привычную размерность: $\mathbf{j} \mapsto \mathbf{j}/\mathcal{V} = \hbar \mathbf{k}/m\mathcal{V}$ — скорость, деленная на объем, т.е. вероятность на единицу площади в единицу времени. Очевидно, что тот же фактор необходимо ввести и для рассеянной волны (она получается в ходе эволюции падающей волны), так что выражение для сечения не изменится.

В итоге, матричный элемент

$$\mathcal{S}_{\mathbf{f}\mathbf{i}} = (2\pi)^3 \delta(\mathbf{k}_{\mathbf{f}} - \mathbf{k}_{\mathbf{i}}) - i2\pi \delta(E_{\mathbf{f}} - E_{\mathbf{i}}) \int \psi_{\mathbf{f}}^{*(0)}(\mathbf{r}) V(r) \psi_{\mathbf{i}}^{(+)}(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r}. \quad (12.33)$$

В этом выражении первый член отвечает вкладу за счет падающей на мишень волны в задаче рассеяния

$$(2\pi)^3 \delta(\mathbf{k}_{\mathbf{f}} - \mathbf{k}_{\mathbf{i}}) = \langle \mathbf{k}_{\mathbf{f}} | \mathbf{k}_{\mathbf{i}} \rangle,$$

а второй можно записать через амплитуду рассеяния $f(\theta)$ согласно ее определению (12.28):

$$\int \psi_{\mathbf{f}}^{*(0)}(\mathbf{r}) V(r) \psi_{\mathbf{i}}^{(+)}(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} = \int d^3\mathbf{r} e^{-i\mathbf{k}_{\mathbf{f}} \cdot \mathbf{r}} V(r) \psi_{\mathbf{i}}^{(+)}(\mathbf{r}) = -\frac{2\pi\hbar^2}{m} f(\theta).$$

Важно подчеркнуть, что интегральное представление для волновой функции и матричного элемента позволило нам доказать сделанное при постановке задачи рассеяния утверждение, что амплитуда перехода пропорциональна дельта-функции от разности энергий начального и конечного асимптотического состояний, так что ее квадрат определяет вероятность перехода в единицу времени.

Поскольку \mathcal{S} -матрица есть предельное значение оператора эволюции при бесконечном времени эволюции, она, как частный случай оператора эволюции, унитарного в любой момент времени, также является унитарной

$$\mathcal{S}\mathcal{S}^\dagger = \mathbb{1}. \quad (12.34)$$

Обычно вводят понятие \mathcal{T} -матрицы рассеяния, чтобы исключить тривиальный вклад падающих на мишень волн из \mathcal{S} -матрицы:

$$\mathcal{S} = \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \mathcal{T}. \quad (12.35)$$

Унитарность \mathcal{S} -матрицы приводит к соотношению

$$\left(\mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \mathcal{T}\right) \left(\mathbb{1} + \frac{i}{\hbar} \mathcal{T}^\dagger\right) = \mathbb{1},$$

откуда следует операторное тождество — соотношение унитарности для \mathcal{T} -матрицы

$$\mathcal{T}\mathcal{T}^\dagger = -2\hbar \Im \mathcal{T}. \quad (12.36)$$

В стационарном случае

$$\mathcal{S}_{\mathbf{f}\mathbf{i}} = \langle \mathbf{k}_{\mathbf{f}} | \mathbf{k}_{\mathbf{i}} \rangle - \frac{i}{\hbar} \langle \mathbf{k}_{\mathbf{f}} | \mathcal{T} | \mathbf{k}_{\mathbf{i}} \rangle = \langle \mathbf{k}_{\mathbf{f}} | \mathbf{k}_{\mathbf{i}} \rangle - \frac{i}{\hbar} 2\pi\hbar \delta(E_{\mathbf{f}} - E_{\mathbf{i}}) \langle \mathbf{k}_{\mathbf{f}} | V | \psi_{\mathbf{i}}^{(+)} \rangle,$$

или

$$\mathcal{T}_{\mathbf{f}\mathbf{i}} = \langle \mathbf{k}_{\mathbf{f}} | \mathcal{T} | \mathbf{k}_{\mathbf{i}} \rangle = -2\pi\hbar \delta(E_{\mathbf{f}} - E_{\mathbf{i}}) \frac{2\pi\hbar^2}{m} f(\theta). \quad (12.37)$$

Если взять диагональный матричный элемент соотношения унитарности для \mathcal{T} -матрицы

$$\langle \mathbf{k}_{\mathbf{i}} | \mathcal{T} \mathcal{T}^\dagger | \mathbf{k}_{\mathbf{i}} \rangle = -2\hbar \Im \langle \mathbf{k}_{\mathbf{i}} | \mathcal{T} | \mathbf{k}_{\mathbf{i}} \rangle,$$

то в правой части будет стоять величина

$$-2\hbar \Im \langle \mathbf{k}_i | \mathcal{T} | \mathbf{k}_i \rangle = 2\pi\hbar \delta(E)|_{E \rightarrow 0} \frac{4\pi\hbar^3}{m} \Im f(0),$$

где $f(0)$ — амплитуда упругого рассеяния вперед, и, как обычно, $2\pi\hbar \delta(E)|_{E \rightarrow 0} = T \rightarrow \infty$ — время наблюдения за частицей при рассеянии. Для левой части тождества унитарности \mathcal{T} -матрицы запишем⁹

$$\langle \mathbf{k}_i | \mathcal{T} \mathcal{T}^\dagger | \mathbf{k}_i \rangle = \int \langle \mathbf{k}_i | \mathcal{T} | \mathbf{k}_f \rangle \frac{d^3 \mathbf{k}_f}{(2\pi)^3} \langle \mathbf{k}_f | \mathcal{T}^\dagger | \mathbf{k}_i \rangle = \int \frac{d^3 \mathbf{k}_f}{(2\pi)^3} |\mathcal{T}_{fi}|^2.$$

Заметим, что вероятность рассеяния в единицу времени

$$dw_{fi} = \frac{|\mathcal{S}_{fi}|^2}{T} \frac{d^3 \mathbf{k}_f}{(2\pi)^3} = \frac{|\mathcal{T}_{fi}|^2}{\hbar^2 T} \frac{d^3 \mathbf{k}_f}{(2\pi)^3},$$

а полное сечение рассеяния¹⁰

$$\sigma = \frac{1}{j_{in}} \int dw_{fi} = \frac{1}{T \hbar^2 j_{in}} \int \frac{d^3 \mathbf{k}_f}{(2\pi)^3} |\mathcal{T}_{fi}|^2.$$

В итоге, время наблюдения T в равенстве сокращается, и унитарность приводит к тождеству

$$\hbar^2 j_{in} \sigma = \frac{4\pi\hbar^3}{m} \Im f(0),$$

так что с учетом $j_{in} = \hbar k_i / m$ окончательно находим

$$\sigma = \frac{4\pi}{k_i} \Im f(0). \quad (12.38)$$

Это тождество составляет содержание *оптической теоремы*, или соотношения Бора–Пайерлса–Плачека, связывающего полное сечение рассеяния с мнимой частью амплитуды упругого рассеяния вперед.

Наконец, введем стационарную \mathcal{T} -матрицу

$$\mathcal{T} = 2\pi\hbar \delta(E_f - E_i) \mathcal{T}_E. \quad (12.39)$$

Тогда интегральное уравнение для состояния

$$|\psi_i^{(+)}\rangle = |\psi_i^{(0)}\rangle + G_E^{(0)} V |\psi_i^{(+)}\rangle$$

позволяет установить для матричного элемента \mathcal{T}_E

$$\langle \mathbf{k}_f | \mathcal{T}_E | \mathbf{k}_i \rangle = \langle \mathbf{k}_f | V | \psi_i^{(+)} \rangle$$

⁹Вообще говоря, необходимо «вставить единицу» как сумму проекторов на базисные состояния в асимптотическом пространстве. Если имеются только упругие столкновения, то это — сумма по волнам де Бройля для рассеянной частицы, как мы это записываем ниже. Но формула остается справедливой и для столкновений с образованием других частиц: пространство асимптотических состояний необходимо расширить, включая все возможные конечные состояния, так что наличие неупругих столкновений не вносит изменений в вывод связи полного сечения с амплитудой упругого рассеяния вперед.

¹⁰Дифференциальное сечение $d\sigma = dw_{fi}/j_{in}$ после подстановки матричного элемента \mathcal{T}_{fi} согласно (12.37) и $d^3 \mathbf{k}_f = km d\Omega dE_f/\hbar^2$, конечно, сводится к стандартному виду $d\sigma = |f(\theta)|^2 d\Omega$.

следующее равенство

$$\begin{aligned}
 \langle \mathbf{k}_f | \mathcal{T}_E | \mathbf{k}_i \rangle &= \langle \mathbf{k}_f | V | \mathbf{k}_i \rangle + \langle \mathbf{k}_f | V G_E^{(0)} V | \psi_i^{(+)} \rangle \\
 &= \langle \mathbf{k}_f | V | \mathbf{k}_i \rangle + \int \langle \mathbf{k}_f | V G_E^{(0)} | \mathbf{k} \rangle \frac{d^3 \mathbf{k}}{(2\pi)^3} \langle \mathbf{k} | V | \psi_i^{(+)} \rangle \\
 &= \langle \mathbf{k}_f | V | \mathbf{k}_i \rangle + \int \langle \mathbf{k}_f | V G_E^{(0)} | \mathbf{k} \rangle \frac{d^3 \mathbf{k}}{(2\pi)^3} \langle \mathbf{k} | \mathcal{T}_E | \mathbf{k}_i \rangle.
 \end{aligned}$$

Это интегральное уравнение можно записать в операторной форме

$$\mathcal{T}_E = V + V G_E^{(0)} \mathcal{T}_E, \quad (12.40)$$

что позволяет строить итерационный ряд, сходящийся в теории возмущений по малому потенциалу¹¹.

12.7. Борновское приближение

В ведущем приближении итераций в уравнении для \mathcal{T}_E -матрицы или, что то же, в интегральном уравнении для волновой функции рассеяния

$$\mathcal{T}_E \approx V, \quad \langle \mathbf{k}_f | \mathcal{T}_E | \mathbf{k}_i \rangle \approx \langle \mathbf{k}_f | V | \mathbf{k}_i \rangle, \quad (12.41)$$

так что

$$\langle \mathbf{k}_f | V | \mathbf{k}_i \rangle = \int d^3 \mathbf{r} V(\mathbf{r}) e^{-i(\mathbf{k}_f - \mathbf{k}_i) \cdot \mathbf{r}} = \tilde{V}(\mathbf{k}_f - \mathbf{k}_i),$$

где \tilde{V} есть ничто иное, как фурье-образ потенциала, зависящий от переданного импульса $\mathbf{q} = \hbar(\mathbf{k}_f - \mathbf{k}_i)$. В итоге, амплитуда рассеяния

$$f(\theta) \approx -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \tilde{V}(\mathbf{k}_f - \mathbf{k}_i). \quad (12.42)$$

Это приближение называется борновским.

Критерий применимости борновского приближения включает в себя два аспекта. Поскольку итерации в исследуемых интегральных уравнениях представляют собой разложение решения по теории возмущений, где в качестве такого возмущения выступает потенциал, степень сходимости ряда можно оценить, во-первых, по малости самой борновской поправки к волновой функции свободной частицы, а во-вторых, по относительной величине поправок высших порядков по возмущению к волновой функции или к сечению рассеяния.

На практике обычно ограничиваются первым условием:

$$|\psi_i^{(+)}(\mathbf{x}) - \psi_i^{(0)}(\mathbf{x})| \ll |\psi_i^{(0)}(\mathbf{x})|, \quad (12.43)$$

а значит, согласно интегральному уравнению

$$\left| \int \mathcal{G}_E^{(0)}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_1) V(\mathbf{x}_1) \psi_i^{(+)}(\mathbf{x}_1) d^3 \mathbf{x}_1 \right| \approx \left| \int \mathcal{G}_E^{(0)}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_1) V(\mathbf{x}_1) \psi_i^{(0)}(\mathbf{x}_1) d^3 \mathbf{x}_1 \right| \ll 1. \quad (12.44)$$

¹¹Обычно потенциал записывают в виде $V \mapsto \lambda V$, где λ — константа связи взаимодействия, которую считают малой $\lambda \rightarrow 0$.

Указанное ограничение должно иметь место *при любых \mathbf{x}* .

В качестве грубой оценки интеграла сверху можно взять интеграл от модулей сомножителей в интегранде

$$\left| \int \mathcal{G}_E^{(0)}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_1) V(\mathbf{x}_1) \psi_i^{(0)}(\mathbf{x}_1) d^3 \mathbf{x}_1 \right| \leq \int |\mathcal{G}_E^{(0)}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_1)| |V(\mathbf{x}_1)| |\psi_i^{(0)}(\mathbf{x}_1)| d^3 \mathbf{x}_1.$$

Тогда для потенциала, отличного от нуля в ограниченной области $r < a$, с характерным масштабом энергии $|V(r)| \sim V_0$, из

$$|\mathcal{G}_E^{(0)}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_1)| \approx \frac{m}{2\pi\hbar^2} \frac{1}{a}, \quad |\psi_i^{(0)}(\mathbf{x}_1)| = 1,$$

находим

$$\frac{mV_0}{\hbar^2} a^2 \ll 1. \quad (12.45)$$

Если ввести обозначение λ_0 для характерной длины волны частицы с энергией V_0 :

$$V_0 = \frac{\hbar^2}{m\lambda_0^2}, \quad (12.46)$$

то условие применимости борновского приближения принимает вид

$$\frac{a^2}{\lambda_0^2} \ll 1. \quad (12.47)$$

Это означает, например, что в случае притягивающего потенциала частица с длиной волны λ_0 не помещается в яме размером a , т.е. в яме нет связанных состояний. В этом же приближении амплитуда рассеяния

$$f \sim \frac{m}{2\pi\hbar^2} V_0 \frac{4\pi}{3} a^3 \approx a \frac{a^2}{\lambda_0^2},$$

и полное сечение

$$\sigma \sim 4\pi |f|^2 \approx 4\pi a^2 \frac{a^4}{\lambda_0^4}.$$

Величину

$$\sigma_{\text{geom.}} = 4\pi a^2$$

обычно называют геометрическим сечением. Поэтому условие применимости борновского приближения еще записывают в виде

$$\sigma \ll \sigma_{\text{geom.}}, \quad (12.48)$$

т.е. рассчитанное в борновском приближении полное сечение должно быть существенно меньше геометрического сечения¹².

Полученные ограничения на применимость приближения Борна можно ослабить, если рассмотреть различные кинематические условия рассеяния.

¹²На самом деле, ограничение является менее строгим, так как малым параметром в относительных единицах является не площадь σ , а линейный размер $\sqrt{\sigma} \sim a^2/\lambda_0^2$.

Медленные частицы ($kr \sim ka \ll 1$). В этом случае экспоненциальные множители в функции Грина и в падающей волне можно заменить единицами

$$e^{ikr} \approx e^{ika} \approx 1.$$

Но это, по сути, повторяет общие рассуждения, приведенные выше, где был взят модуль этих экспоненциальных факторов, также равный единице, так что ограничение на величину потенциала остается прежним.

Быстрые частицы ($kr \sim ka \gg 1$). Функция Грина при $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \approx a$

$$\mathcal{G}_E^{(0)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \sim \frac{m}{2\pi\hbar^2} \frac{1}{a} e^{ika},$$

а волна де Бройля

$$\psi_i^{(0)}(\mathbf{r}') = e^{ikr' \cos \theta'} \sim e^{ika \cos \theta'}$$

быстро осциллирует как функция от $r' \sim a$ и зануляет интеграл везде, кроме узкой области по углам:

$$e^{ika \cos \theta'} \sim 1, \quad |\cos \theta'| \lesssim \frac{1}{ka} \ll 1.$$

Ограничивая область интегрирования по телесному углу этим конусом, легко находим критерий применимости борновского приближения для быстрых частиц

$$\frac{mV_0}{\hbar^2} a^2 \frac{1}{ka} \ll 1 \quad \Leftrightarrow \quad \frac{a^2}{\lambda_0^2} \ll ka, \quad (12.49)$$

что, конечно, значительно слабее условия для медленных частиц.

Лекция № 13

Движение частицы в сферических координатах в области с нулевым потенциалом, рекуррентные соотношения для радиальных волновых функций с различными l , асимптотическое поведение при $r \rightarrow \infty$, сферические волны свободной частицы, сохранение потока вероятности на бесконечности при упругом рассеянии и фазовые сдвиги, разложение волны де Бройля по парциальным волнам, парциальные амплитуды рассеяния и их связь с фазовыми сдвигами, парциальные сечения и оптическая теорема, интегральное представление для парциальных амплитуд, борновское приближение для сдвига фаз, зависимость фаз рассеяния от энергии, постоянное сечение для медленных частиц, длина рассеяния, вклад парциальных волн для быстрых частиц, свойства симметрии по перестановкам для тождественных частиц с четным и нечетным спином при потенциальном рассеянии и выражение для сечения, роль обменных сил, качественные замечания о дальнедействующих силах кулоновского типа: искажение асимптотических состояний; о резонансе в l -канале: “Арганд-плот”, брейт-вигнеровское сечение, особенности функции Грина при наличии резонанса; о неупругих столкновениях: полное сечение неупругих каналов и оптическая теорема для полного сечения рассеяния.

В центральном поле сохраняется вектор орбитального момента. Поэтому, наряду с волнами де Бройля с заданным волновым вектором, асимптотические состояния в задаче рассеяния можно разлагать по базису сферических волн: состояниям с определенными значениями орбитального момента l и его проекции m на заданную ось. Такой подход называют парциально-волновым анализом.

13.1. Сферические волны свободной частицы

В области, где потенциалом можно пренебречь или он равен нулю, уравнение для стационарного состояния с энергией $E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ и заданным значением орбитального момента l и его проекции m

$$\psi(\mathbf{r}) = R_{kl}(r) Y_{l,m}(\theta, \phi)$$

имеет вид

$$R_{kl}''(r) + \frac{2}{r} R_{kl}'(r) + \left(k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) R_{kl}(r) = 0, \quad (13.1)$$

т.е. является уравнением для свободной частицы, которое мы и исследуем более детально в этом параграфе.

Согласно общему свойству радиального уравнения при $r \rightarrow 0$

$$R_{kl}(r) \sim r^l,$$

так что проведем замену функции

$$R_{kl}(r) = r^l \chi_{kl}(r). \quad (13.2)$$

Тогда элементарное дифференцирование

$$R_{kl}'(r) = r^l \chi_{kl}' + l r^{l-1} \chi_{kl}, \quad R_{kl}''(r) = r^l \chi_{kl}'' + 2l r^{l-1} \chi_{kl}' + l(l-1) r^{l-2} \chi_{kl},$$

после приведения подобных членов приводит к уравнению

$$\chi_{kl}'' + \frac{2}{r} (l+1) \chi_{kl}' + k^2 \chi_{kl} = 0. \quad (13.3)$$

Введем

$$\chi_{kl}(r) = v_{kl}(z), \quad z = r^2.$$

Тогда

$$\chi_{kl}' = 2r v_{kl}', \quad \chi_{kl}'' = 4z v_{kl}'' + 2v_{kl}',$$

где штрих у функции от z означает дифференцирование по z : $v' = dv/dz$. Уравнение для $v_{kl}(r^2)$ примет вид

$$4z v_{kl}'' + 2(2l+3) v_{kl}' + k^2 v_{kl} = 0. \quad (13.4)$$

Дифференцирование этого уравнения по z дает

$$4z v_{kl}''' + 2(2(l+1)+3) v_{kl}'' + k^2 v_{kl}' = 0.$$

Это уравнение тождественно удовлетворяется, если v_{kl}' является решением уравнения для $v_{k(l+1)}$, т.е.

$$v_{k(l+1)}(z) = B v_{kl}'(z) \Rightarrow \chi_{k(l+1)}(r) = \frac{B}{2r} \chi_{kl}'(r).$$

Положим $B = 2$ и запишем выведенные нами рекуррентные соотношения для радиальных волновых функций с различными значениями орбитального момента в виде

$$R_{kl}(r) = c_l \frac{r^l}{k^l} \left(\frac{1}{r} \frac{d}{dr} \right)^l R_{k0}(r). \quad (13.5)$$

Здесь $R_{k0}(r)$ — решение радиального уравнения для $l = 0$, фактор k^{-l} введен для удобства, а c_l — нормировочные постоянные. Для $R_{k0}(r) = u(r)/r$ стандартно имеем

$$u'' + k^2 u = 0, \quad (13.6)$$

откуда

$$u = \tilde{c}_0 \left\{ -e^{-ikr} + S_0 e^{ikr} \right\}, \quad (13.7)$$

или

$$R_{k0}(r) = \frac{\tilde{c}_0}{r} \left\{ -e^{-ikr} + S_0 e^{ikr} \right\}, \quad (13.8)$$

где S_0 — константа относительной нормировки расходящейся части волны. Полагая $\tilde{c}_0 = 1$, находим общее *точное* выражение для волновой функции в области, где центральный потенциал обращается в нуль, и в частности, в асимптотической области $r \rightarrow \infty$,

$$R_{kl}(r) = c_l \frac{r^l}{k^l} \left(\frac{1}{r} \frac{d}{dr} \right)^l \frac{1}{r} \left\{ -e^{-ikr} + S_l e^{ikr} \right\}. \quad (13.9)$$

При $r \rightarrow \infty$ ведущий вклад получается дифференцированием экспонент, так что

$$\begin{aligned} R_{kl}(r) &\simeq c_l \frac{i^l}{r} \left\{ (-1)^{l+1} e^{-ikr} + S_l e^{ikr} \right\} \\ &= c_l \frac{(-1)^l}{r} \left\{ -e^{-i(kr - \frac{\pi}{2}l)} + S_l e^{i(kr - \frac{\pi}{2}l)} \right\}. \end{aligned} \quad (13.10)$$

Если потенциал тождественно равен нулю, то уравнение справедливо во всем пространстве, и приведенное общее выражение необходимо ограничить на случай свободной частицы: волновая функция должна вести себя как r^l при $r \rightarrow 0$. Экспоненты в радиальной функции общего вида (13.9) можно разложить в сумму синуса и косинуса от kr , из разложения которых в ряд Тейлора сразу следует, что вклад косинуса необходимо занулить, так как он приводит к члену $1/r$, дифференцирование которого дает сингулярность при $r = 0$. Напротив, для вклада синуса получим

$$\left(\frac{1}{r} \frac{d}{dr} \right)^l \frac{\sin kr}{r} \Big|_{r \rightarrow 0} = (-1)^l \left(\frac{1}{r} \frac{d}{dr} \right)^l \frac{(kr)^{2l+1}}{r(2l+1)!} \Big|_{r \rightarrow 0} = (-1)^l k^{2l+1} \frac{(2l)!!}{(2l+1)!},$$

так что радиальная волновая функция имеет правильное поведение в нуле. Итак, для этого необходимо, чтобы для свободной частицы¹³

$$S_l^{(0)} \equiv 1, \quad (13.11)$$

и тогда¹⁴

$$R_{kl}^{(0)}(r) = c_l^{(0)} (-1)^l \frac{r^l}{k^l} \left(\frac{1}{r} \frac{d}{dr} \right)^l \frac{1}{r} \left\{ -e^{-ikr} + e^{ikr} \right\}, \quad (13.12)$$

¹³Различные выборы постоянных S_l определяют радиальные функции, которые отвечают сферическим функциям Бесселя $j_l(kr)$ ($R_{k0} \sim \frac{\sin kr}{kr}$), функциям Неймана $n_l(kr)$ ($R_{k0} \sim \frac{\cos kr}{kr}$), функциям Ганкеля $h_l^\pm(kr)$ ($R_{k0} \sim \frac{e^{\pm ikr}}{kr}$).

¹⁴Мы сделали подстановку $c_l \mapsto c_l^{(0)} (-1)^l$.

что в асимптотической области $r \rightarrow \infty$ дает

$$\begin{aligned} R_{kl}^{(0)}(r) &\simeq c_l^{(0)} \frac{1}{r} \left\{ -e^{-i(kr - \frac{\pi}{2}l)} + e^{i(kr - \frac{\pi}{2}l)} \right\} \\ &= c_l^{(0)} \frac{2i}{r} \sin(kr - \frac{\pi}{2}l). \end{aligned} \quad (13.13)$$

Для центрального потенциала, достаточно быстро обращающегося в нуль на бесконечности, радиальная волновая функция общего вида (13.9) в задаче рассеяния описывает в асимптотической области суперпозицию падающей на мишень и рассеянной волн со сферическим фронтом (13.10). *В силу унитарности падающий и рассеянный потоки равны друг другу для упругого рассеяния*, т.е.

$$|S_l| \equiv 1, \quad S_l = e^{2i\delta_l}, \quad \delta_l \in \mathbb{R}, \quad (13.14)$$

где δ_l — фазовые сдвиги, зависящие от потенциала, энергии и орбитального момента. По построению

$$\delta_l \in [0, \pi]. \quad (13.15)$$

Значит, при $r \rightarrow \infty$ волновая функция в разложении по парциальным волнам имеет вид

$$\begin{aligned} R_{kl}(r) &\simeq c_l^{(0)} \frac{1}{r} \left\{ -e^{-i(kr - \frac{\pi}{2}l)} + S_l e^{i(kr - \frac{\pi}{2}l)} \right\} \\ &= c_l^{(0)} \frac{2i}{r} e^{i\delta_l} \sin(kr - \frac{\pi}{2}l + \delta_l). \end{aligned} \quad (13.16)$$

Подчеркнем, что в этой формуле коэффициенты $c_l^{(0)}$ те же, что и в разложении по парциальным волнам волновой функции свободной частицы, так как в задаче рассеяния падающая волна в стационарном out-состоянии должна тождественно совпадать в падающей волной свободного in-состояния.

Итак, мы установили, что в случае исключительно упругих столкновений процесс рассеяния описывается парциальными фазовыми сдвигами, и определили асимптотический вид волновой функции в задаче рассеяния. Теперь для расчета сечения необходимо отнормировать парциальные потоки так, чтобы они отвечали потокам падающей волны де Бройля, потому что в эксперименте осуществляется только такая возможность, когда состояниями асимптотического in-пространства являются именно свободные монохроматические волны, а для out-состояний возможен парциально-волновой анализ: наблюдается разложение по орбиталям.

13.2. Разложение волны де Бройля по парциальным волнам

Разложим состояние $|\mathbf{k}\rangle$ с заданным волновым вектором \mathbf{k} по базису свободных сферических волн $|k; l, m\rangle$ с энергией $E = \hbar^2 k^2 / 2m$ и орбитальным моментом l с проекцией m в координатном пространстве:

$$\langle \mathbf{r} | \mathbf{k} \rangle = \sum_{l, m} \langle \mathbf{r} | k; l, m \rangle \langle k; l, m | \mathbf{k} \rangle. \quad (13.17)$$

Обычно вводят единичные векторы

$$\mathbf{n} = \frac{\mathbf{r}}{r}, \quad \mathbf{n}^{(k)} = \frac{\mathbf{k}}{k}.$$

Тогда, очевидно, волна де Бройля

$$\langle \mathbf{r} | \mathbf{k} \rangle = e^{i k r \mathbf{n} \cdot \mathbf{n}^{(k)}}. \quad (13.18)$$

Состояние $\langle \mathbf{r} | k; l, m \rangle$ есть ничто иное, как решение стационарного уравнения Шредингера для свободной частицы в координатном представлении

$$\langle \mathbf{r} | k; l, m \rangle = R_{kl}(r) Y_{l,m}(\mathbf{n}),$$

где $Y_{l,m}(\mathbf{n})$ — сферическая гармоника, которая зависит от угловых координат единичного радиус-вектора \mathbf{n} , а $\langle k; l, m | \mathbf{k} \rangle$ — эрмитово сопряженное решение стационарного уравнения Шредингера в импульсном представлении (представлении волнового вектора):

$$\langle k; l, m | \mathbf{k} \rangle = \tilde{R}_{kl}^*(k) Y_{l,m}^*(\mathbf{n}^{(k)}).$$

Переопределим радиальную волновую функцию, поглощая фактор $\tilde{R}_{kl}(k)$, так что в согласии с общим рассмотрением свободных сферических волн разложение примет вид

$$e^{i k r \mathbf{n} \cdot \mathbf{n}^{(k)}} = 4\pi \sum_{l,m} R_{kl}^{(0)}(r) Y_{l,m}(\mathbf{n}) Y_{l,m}^*(\mathbf{n}^{(k)}), \quad (13.19)$$

где

$$R_{kl}^{(0)}(r) = c_l^{(0)} (-1)^l \frac{r^l}{k^l} \left(\frac{1}{r} \frac{d}{dr} \right)^l \frac{1}{r} \left\{ -e^{-i k r} + e^{i k r} \right\}, \quad (13.12)$$

с неизвестными коэффициентами $c_l^{(0)}$, задачу определения которых мы сейчас решаем.

В волне скалярное произведение векторов $\mathbf{n} \cdot \mathbf{n}^{(k)}$ симметрично по перестановке единичных векторов, в разложении же стоит произведение сферических гармоник $Y_{l,m}(\mathbf{n}) Y_{l,m}^*(\mathbf{n}^{(k)})$, которое можно преобразовать, пользуясь свойством комплексного сопряжения сферических функций

$$Y_{l,m}(\mathbf{n}) = (-1)^m Y_{l,-m}^*(\mathbf{n}),$$

откуда

$$Y_{l,m}(\mathbf{n}) Y_{l,m}^*(\mathbf{n}^{(k)}) = Y_{l,-m}^*(\mathbf{n}) Y_{l,-m}(\mathbf{n}^{(k)}),$$

и значит, суммирование по m в правой части разложения (13.19) дает результат, симметричный по перестановке единичных векторов, как это и должно быть.

Вычислим коэффициенты разложения $C_l^{(0)}$ в случае, когда волновой вектор направлен вдоль оси z , откуда $\mathbf{n} \cdot \mathbf{n}^{(k)} = \cos \theta$, т.е. $\theta^{(k)} = \phi^{(k)} = 0$, и в разложении участвуют только вклады с $m = 0$

$$Y_{l,m}^*(\mathbf{n}^{(k)}) \mapsto Y_{l,0}^*(0,0) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} P_l(1) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}},$$

и

$$Y_{l,m}(\mathbf{n}) \mapsto Y_{l,0}(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} P_l(\cos \theta).$$

Тогда разложение принимает вид

$$e^{i k r \cos \theta} = \sum_l (2l+1) P_l(\cos \theta) R_{kl}^{(0)}(r). \quad (13.20)$$

Из ортогональности полиномов Лежандра

$$\int_{-1}^1 d \cos \theta \cdot P_{l'}(\cos \theta) P_l(\cos \theta) = \frac{2}{2l+1} \delta_{ll'}$$

и принятого разложения следует, что

$$\int_{-1}^1 d \cos \theta \cdot P_l(\cos \theta) e^{i k r \cos \theta} = 2 R_{kl}^{(0)}(r). \quad (13.21)$$

рассмотрим обе части этого равенства при $r \rightarrow \infty$. Тогда слева интегрирование по частям дает

$$\int_{-1}^1 d \cos \theta \cdot P_l(\cos \theta) e^{i k r \cos \theta} = \frac{1}{i k r} P_l(\cos \theta) e^{i k r \cos \theta} \Big|_{-1}^{+1} - \frac{1}{i k r} \int_{-1}^1 d \cos \theta \cdot P_l'(\cos \theta) e^{i k r \cos \theta}.$$

Очевидно, что интегрирование по частям следует повторить еще $l-1$ раз, так как полином Лежандра P_l является полиномом степени l . Однако в пределе $r \rightarrow \infty$ каждый дополнительный шаг интегрирования по частям приводит к вкладам $\mathcal{O}(1/r^2)$. Таким образом,

$$\int_{-1}^1 d \cos \theta \cdot P_l(\cos \theta) e^{i k r \cos \theta} = \frac{1}{i k r} P_l(\cos \theta) e^{i k r \cos \theta} \Big|_{-1}^{+1} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{r^2}\right). \quad (13.22)$$

По построению $P_l(1) = 1$ и $P_l(-1) = (-1)^l$, так что окончательно асимптотически получаем

$$\int_{-1}^1 d \cos \theta \cdot P_l(\cos \theta) e^{i k r \cos \theta} \simeq \frac{1}{i k r} \left\{ e^{i k r} - (-1)^l e^{-i k r} \right\}. \quad (13.23)$$

С другой стороны, асимптотическое поведение радиальной волновой функции сферической волны было нами установлено в предыдущем параграфе

$$R_{kl}^{(0)}(r) \simeq c_l^{(0)} (-i)^l \frac{1}{r} \left\{ e^{i k r} - (-1)^l e^{-i k r} \right\}.$$

Значит, из (13.21) находим

$$c_l^{(0)} = i^l \frac{1}{2ik}. \quad (13.24)$$

Таким образом, разложение окончательно принимает вид¹⁵

$$e^{i k r \cos \theta} = \sum_l (2l+1) P_l(\cos \theta) (-i)^l \frac{r^l}{2ik^{l+1}} \left(\frac{1}{r} \frac{d}{dr} \right)^l \frac{1}{r} \left\{ -e^{-i k r} + e^{i k r} \right\} \quad (13.25)$$

с асимптотикой при $r \rightarrow \infty$

$$\begin{aligned} e^{i k r \cos \theta} &\simeq \sum_l (2l+1) P_l(\cos \theta) \frac{1}{2ikr} \left\{ e^{i k r} - (-1)^l e^{-i k r} \right\} \\ &= \sum_l (2l+1) P_l(\cos \theta) i^l \cdot \frac{\sin(kr - \frac{\pi}{2}l)}{kr}. \end{aligned} \quad (13.26)$$

¹⁵Обычно вводят безразмерную переменную $\rho = kr$, от которой только и зависит разложение плоской волны по сферическим.

13.3. Фазовые сдвиги и парциальные сечения

Стационарная волновая функция в задаче рассеяния имеет асимптотический вид

$$\psi_{\mathbf{i}}^{(+)}(\mathbf{r}) \simeq e^{i\mathbf{k}_{\mathbf{i}} \cdot \mathbf{r}} + \frac{e^{ikr}}{r} f(\theta), \quad k = |\mathbf{k}_{\mathbf{i}}|.$$

Выберем в качестве оси z направление волнового вектора начального состояния и разложим амплитуду рассеяния по базису полиномов Лежандра

$$f(\theta) = \sum_l f_l P_l(\cos \theta). \quad (13.27)$$

Асимптотическое разложение волновой функции по сферическим волнам согласно общему рассмотрению имеет вид

$$\psi_{\mathbf{i}}^{(+)}(\mathbf{r}) \simeq \sum_l (2l+1) P_l(\cos \theta) \frac{1}{2ikr} \left\{ S_l e^{ikr} - (-1)^l e^{-ikr} \right\}. \quad (13.28)$$

С другой стороны, разложение плоской волны свободной частицы и амплитуды рассеяния по полиномам Лежандра дает

$$e^{i\mathbf{k}_{\mathbf{i}} \cdot \mathbf{r}} + \frac{e^{ikr}}{r} f(\theta) \simeq \sum_l (2l+1) P_l(\cos \theta) \frac{1}{2ikr} \left\{ \left(1 + \frac{2ik f_l}{2l+1} \right) e^{ikr} - (-1)^l e^{-ikr} \right\}. \quad (13.29)$$

Значит,

$$S_l = 1 + \frac{2ik f_l}{2l+1} \Leftrightarrow f_l = \frac{(2l+1)}{2ik} (S_l - 1). \quad (13.30)$$

Выражая S_l через фазовые сдвиги

$$S_l = e^{2i\delta_l},$$

легко находим

$$f_l = \frac{2l+1}{k} e^{i\delta_l} \sin \delta_l. \quad (13.31)$$

Дифференциальное сечение рассеяния по общей формуле

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \sum_{l,l'} f_l P_l(\cos \theta) f_{l'}^* P_{l'}(\cos \theta) \quad (13.32)$$

имеет характерную зависимость от углов, которая и подвергается парциально-волновому анализу при исследовании экспериментальных данных. В силу ортогональности полиномов Лежандра полное сечение рассеяния

$$\sigma = 4\pi \sum_l \frac{|f_l|^2}{2l+1} = \frac{4\pi}{k^2} \sum_l (2l+1) \sin^2 \delta_l. \quad (13.33)$$

Обычно вводят понятие парциального сечения

$$\sigma_l = \frac{4\pi}{k^2} (2l+1) \sin^2 \delta_l, \quad (13.34)$$

которое принимает максимальное значение при $\delta_l = \pi/2$. Отметим, что для рассеяния вперед $P_l(\cos \theta = 1) = 1$ и

$$\Im f_l = \frac{2l+1}{k} \sin^2 \delta_l,$$

так что

$$\sigma_l = \frac{4\pi}{k} \Im f_l, \quad (13.35)$$

т.е. оптическая теорема справедлива для каждого парциального сечения упругого рассеяния в отдельности.

13.4. Свойства фазовых сдвигов

Согласно интегральному уравнению для амплитуды рассеяния

$$f(\theta) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3\mathbf{r}' e^{-i\mathbf{k}_E \cdot \mathbf{r}'} V(r') \psi_i^{(+)}(\mathbf{r}') \quad (12.28)$$

несложно получить выражение и для фазы рассеяния, если воспользоваться разложением по парциальным волнам для волны де Бройля и точного решения стационарного уравнения $\psi_i^{(+)}(\mathbf{r})$ с подходящими граничными условиями. В самом деле,

$$e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}'} = \left(e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}'} \right)^* = 4\pi \sum_{l,m} R_{kl}^{*(0)}(r) Y_{l,m}^*(\mathbf{n}') Y_{l,m}(\mathbf{n}^{(k)}),$$

где $Y_{l,m}^*(\mathbf{n}') = Y_{l,m}^*(\theta', \phi')$, $Y_{l,m}(\mathbf{n}^{(k)}) = Y_{l,m}(\theta, \phi)$, и

$$\psi_i^{(+)}(\mathbf{r}') = \sum_{l'} (2l' + 1) P_{l'}(\cos \theta') R_{kl'}(r'),$$

так что интегрирование по телесному углу в выражении для амплитуды рассеяния (12.28) элементарно дает

$$\int d\Omega' \cdot Y_{l,m}^*(\theta', \phi') \sqrt{\frac{2l'+1}{4\pi}} P_{l'}(\cos \theta') = \langle l, m | l', 0 \rangle = \delta_{ll'} \delta_{m0}.$$

Поэтому амплитуда выражается в виде ряда

$$f(\theta) = -\frac{2m}{\hbar^2} \sum_l (2l+1) P_l(\cos \theta) \int dr \cdot r^2 R_{kl}^{*(0)}(r) V(r) R_{kl}(r). \quad (13.36)$$

Следуя определению, парциальные амплитуды

$$f_l = -\frac{2m}{\hbar^2} (2l+1) \int dr \cdot r^2 R_{kl}^{*(0)}(r) V(r) R_{kl}(r). \quad (13.37)$$

Функция $R_{kl}^{(0)}(r)$ — решение одномерного радиального уравнения Шредингера, комплексная фаза которого фиксирована асимптотическим условием

$$R_{kl}^{(0)}(r) \simeq i^l \cdot \frac{\sin(kr - \frac{\pi}{2}l)}{kr},$$

так же, как и фаза точного решения стационарного уравнения Шредингера с потенциалом

$$R_{kl}(r) \simeq e^{i\delta_l} i^l \cdot \frac{\sin(kr - \frac{\pi}{2}l + \delta_l)}{kr}.$$

Поэтому можно перейти к *вещественным* волновым функциям $\Phi(r)$ в радиальных уравнениях с заданными асимптотиками на бесконечности, так что

$$R_{kl}^{(0)}(r) = i^l \cdot \Phi_{kl}^{(0)}(r), \quad R_{kl}(r) = e^{i\delta_l} i^l \cdot \Phi_{kl}(r).$$

Тогда

$$f_l = -\frac{2m}{\hbar^2} (2l+1) e^{i\delta_l} \int dr \cdot r^2 \Phi_{kl}^{(0)}(r) V(r) \Phi_{kl}(r). \quad (13.38)$$

Сравнивая последнее выражение с формулой для парциальной амплитуды в терминах сдвига фазы (13.31), получаем интегральное представление для фазы

$$\sin \delta_l = -\frac{2mk}{\hbar^2} \int dr \cdot r^2 \Phi_{kl}^{(0)}(r) V(r) \Phi_{kl}(r). \quad (13.39)$$

В борновском приближении, очевидно,

$$\sin \delta_l \approx -\frac{2mk}{\hbar^2} \int dr \cdot \{r \Phi_{kl}^{(0)}(r)\}^2 V(r). \quad (13.40)$$

Интегральное представление позволяет установить некоторые свойства сдвигов фаз, причем, поскольку основные свойства радиальных волновых функций для свободных волн и точного решения уравнения Шредингера с потенциалом качественно по своему поведению вблизи нуля и периоду осцилляций практически совпадают, выводы о парциальных амплитудах, сделанные на основе борновского приближения и точного интегрального представления, мало отличаются друг от друга, за исключением важного случая резонансов.

Пусть потенциал имеет характерную величину $|V| \simeq V_0$, и он существенно отличен от нуля только в области $r < a$. Как мы выяснили, вблизи нуля поведение радиальной волновой функции¹⁶

$$R_{kl} \sim (rk)^l \frac{(2l)!!}{(2l+1)!} \sim (rk)^l \frac{2^l l! e^{-l} \sqrt{2\pi l}}{(2l+1)^{2l+1} e^{-2l-1} \sqrt{2\pi(2l+1)}} \sim \left(\frac{erk}{2l}\right)^l \sim \left(\frac{rk}{l}\right)^l,$$

где мы воспользовались формулой Стирлинга для оценки факториалов и опустили несущественные числовые множители. При этом удобно считать для общности рассмотрения, что эти выражения остаются справедливыми и при $l \rightarrow 0$, если формально положить $l^l \rightarrow \text{const.}$, в оправданности чего можно убедиться, непосредственно подставив $R_{k0} \sim \text{const.}$ Значит, интеграл, определяющий фазу, можно оценить как

$$\int dr \cdot \{r \Phi_{kl}^{(0)}(r)\}^2 V(r) \sim \frac{a^2 V_0}{k} \left(\frac{ak}{l}\right)^{2l+1},$$

¹⁶ Из этого выражения видно, что радиальная функция становится сравнимой с единицей при $kr \simeq l$. Но $R_{kl}(r)$ ограничена по модулю величиной порядка единицы, и поэтому она получает поправки, которые останавливают ее рост, так что функция становится убывающей и осциллирующей при $kr \geq l$. Это означает, что асимптотическое выражение для радиальной пси-функции в парциальной волне при $r \rightarrow \infty$ становится справедливым при $kr \gg l$, что может быть важно, если задача рассеяния решается приближенно для быстрых частиц $ka \gg 1$: тогда можно считать, что $R_{kl} \sim \sin(kr - \frac{\pi}{2}l + \delta_l)/(kr)$ при $r \geq a$, если $l \ll ka$.

откуда

$$\sin \delta_l \sim \frac{2mV_0}{\hbar^2} a^2 \left(\frac{ak}{l} \right)^{2l+1} \quad \text{и} \quad \sin \delta_0 \sim \frac{2mV_0}{\hbar^2} a^3 k. \quad (13.41)$$

Из этих оценок заключаем, что рассеяние частиц с $l \gg ka$ подавлено. Этот факт согласуется с классическим рассмотрением, поскольку орбитальный момент падающей на мишень частицы можно оценить как произведение волнового вектора (импульса) на прицельное расстояние b , так что при

$$l \sim kb \gg ka \quad \Rightarrow \quad b \gg a,$$

т.е. прицельное расстояние много больше радиуса действия потенциала, и рассеяния не происходит.

С другой стороны, малый вклад в сечение парциальных волн с $l \gg ka$ можно понять, исходя из относительного вклада центробежного потенциала в энергию частицы при больших $l \gg 1$

$$\frac{\Delta V_l(r)}{E} = \frac{\hbar^2 l^2}{2mE r^2} \approx \left(\frac{l}{kr} \right)^2.$$

Значит, вклад орбитального момента в энергию радиального движения создает при $r = a$ потенциальный барьер относительной высоты

$$\frac{l^2}{(ka)^2}.$$

При $l \ll ka$ происходит надбарьерное рассеяние, и частица достигает потенциала, отличного от нуля при $r < a$. При $l \gg ka$ проникаемость высокого и широкого барьера сильно подавлена, вероятность проникновения на расстояния $r < a$ крайне мала, так что частица практически рассеивается также, как и в случае свободного движения: вклад области, где существенно наличие потенциала, пренебрежимо мал, т.е. фазы рассеяния близки к нулю (см. рис. 9.4).

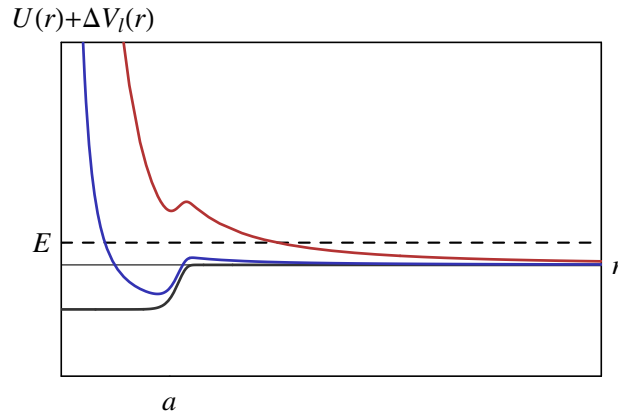


Рис. 9.4: Потенциал радиального движения для $l = 0$ (нижняя кривая) и при $l = 0.7ka$ (средняя кривая), $l = 2ka$ (верхняя кривая).

Медленные частицы ($ka \ll 1$). В этом случае доминирует рассеяние с $l \leq ka \ll 1$, т.е. с $l = 0$: s -рассеяние. Амплитуда рассеяния не зависит от углов, и при $\delta_0 \sim ka \rightarrow 0$ единственная фаза, отличная от нуля является вещественной:

$$f_0 = \frac{1}{k} \sin \delta_0 e^{i\delta_0} \approx \frac{\delta_0}{k} = -a_0, \quad (13.42)$$

где a_0 — длина рассеяния¹⁷. Итак, для медленных частиц дифференциальное сечение рассеяния является изотропным, а полное равно постоянной величине

$$\sigma = 4\pi \frac{|f_0|^2}{k^2} \Big|_{k \rightarrow 0} = 4\pi a_0^2, \quad (13.43)$$

которая не зависит от энергии.

Задача 7. Найти сечение рассеяния медленных частиц на твердой сфере радиуса a_0 .

Решение. Потенциал твердой сферы

$$U(r) = \begin{cases} U_0 \rightarrow +\infty, & r < a_0, \\ 0, & r > a_0, \end{cases}$$

в области $r < a_0$ непроницаем для частиц, т.е. на границе он создает бесконечно большую силу отталкивания, так что U_0 обращается в бесконечность при $r < a_0$. Значит, волновая функция тождественно равна нулю при $r \leq a_0$. Для медленных частиц существенным является вклад с $l = 0$, радиальная волновая функция которого при $r > a_0$, где потенциал равен нулю, известна

$$R_{k0}(r) = A \frac{\sin(kr + \delta_0)}{kr}, \quad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}, \quad A = \text{const.}$$

По непрерывности волновой функции

$$R_{k0}(r) \Big|_{r=a_0} = 0 \quad \Rightarrow \quad \sin(ka_0 + \delta_0) = 0,$$

откуда

$$\delta_0 = -ka_0, \quad f_0 \approx \frac{\delta_0}{k} = -a_0.$$

Эта аналогия с рассеянием на твердой сфере и послужила аргументом для того определения длины рассеяния, которое мы дали выше. Сечение, очевидно, $\sigma = 4\pi a_0^2$. ■

Исключение возникает в случае, если по каким-либо причинам длина рассеяния обращается в нуль, например, при деструктивной интерференции в интеграле для сдвига фазы, когда рассеяние происходит на потенциале, в котором притяжение компенсируется отталкиванием. Тогда полное сечение определяется подавленными высшими парциальными волнами, и дифференциальное сечение перестает быть изотропным, а полное зависит от энергии (например, $\sigma_1 \sim E^2$). Такое аномальное поведение сечения для медленных частиц называется эффектом Рамзауэра.

Задача 8. Найти сечение рассеяния медленных частиц на глубокой сферической яме радиуса a_0 .

Решение. Потенциал ямы

$$U(r) = \begin{cases} -U_0, & r < a_0, \\ 0, & r > a_0, \end{cases}$$

¹⁷ Длина рассеяния может быть и отрицательной, что очевидно, например, из выражения для фазы рассеяния в борновском приближении: если потенциал притягивающий, то фаза заведомо положительна.

Решение уравнения Шредингера для радиальной волновой функции при $l = 0$ запишется в общем виде как

$$R_{k0}(r) = \begin{cases} A \frac{\sin(k_u r)}{k_u r}, & k_u^2 = \frac{2m(E + U_0)}{\hbar^2}, \quad r < a_0, \\ B \frac{\sin(kr + \delta_0)}{kr}, & k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}, \quad r > a_0, \end{cases}$$

где A, B — константы, которые можно определить исходя из условия непрерывности волновой функции. Фазу вычислим из условия непрерывности логарифмической производной радиальной функции

$$\left. \frac{R'_{k0}(r)}{R_{k0}(r)} \right|_{r=a_0-0} = \left. \frac{R'_{k0}(r)}{R_{k0}(r)} \right|_{r=a_0+0},$$

причем для медленных частиц $ka_0 \ll 1$ дифференцирование при $r = a_0 + 0$ дает

$$R'_{k0}(r) \sim k \frac{\cos(\bullet)}{kr} - \frac{\sin(\bullet)}{kr^2} = \frac{1}{kr^2} \{kr \cos(\bullet) - \sin(\bullet)\},$$

а при $r = a_0 - 0$ в глубокой яме $k_u a_0 \gg 1$

$$R'_{k0}(r) \sim k_u \frac{\cos(*)}{k_u r} - \frac{\sin(*)}{k_u r^2} = \frac{1}{k_u r^2} \{k_u r \cos(*) - \sin(*)\}.$$

Тогда непрерывность логарифмической производной дает

$$\tan(ka_0 + \delta_0) = \frac{k}{k_u} \tan(k_u a_0) \Rightarrow \delta_0 = -ka_0 + \arctan \left[\frac{k}{k_u} \tan(k_u a_0) \right].$$

Если $\tan(k_u a_0) \rightarrow \pm\infty$, то вкладом $ka_0 \rightarrow 0$ следует пренебречь и $\delta_0 \rightarrow \pm\pi/2$, так что имеет место резонанс: сечение рассеяния принимает максимально допустимое значение для парциальной волны $l = 0$, и оно существенно больше геометрического значения: $\sigma_0 = 4\pi/k^2 = 4\pi a_0^2/(ka_0)^2 \gg 4\pi a_0^2$.

В противном случае, когда $\tan(k_u a_0)$ принимает конечные значения, в пределе малых импульсов $k \rightarrow 0$ в яме $k_u \rightarrow k_u^0 = \sqrt{2mU_0}/\hbar$, и фаза

$$\delta_0 \approx k \left\{ \frac{1}{k_u^0} \tan(k_u^0 a_0) - a_0 \right\} = \frac{k}{k_u^0} \{ \tan(k_u^0 a_0) - k_u^0 a_0 \}.$$

При условии

$$\tan(k_u^0 a_0) = k_u^0 a_0 \quad (13.44)$$

фаза δ_0 , а значит, и длина рассеяния обращаются в нуль, т.е. имеет место эффект Рамзауера: сечение рассеяния определяется высшими парциальными волнами, так что оно аномально мало, зависит от энергии и от углов. При этом (13.44) совпадает с условием появления в яме связанного состояния. ■

Быстрые частицы ($ka \gg 1$). Как мы уже выяснили, для быстрых частиц вклад в полное сечение дают парциальные волны с

$$l \leq ka \gg 1.$$

При этом, поскольку максимальное значение парциального сечения $\sigma_l^{\max} = 4\pi(2l+1)/k^2$ достигается при $\sin \delta_l = 1$, полное сечение не превышает величину

$$\sigma < \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{ka} (2l+1) = \frac{4\pi}{k^2} (ka+1)^2 \approx 4\pi a^2 = \sigma_{\text{геом.}},$$

т.е. оно ограничено геометрическим сечением.

Задача 9. Найти сечение рассеяния быстрых частиц на твердой сфере радиуса a .

Решение. Вклад частиц с $l \gg ka$ в сечение рассеяния пренебрежимо мал. Для частиц с $l \leq ka$, определяющих сечение, радиальные волновые функции при $r > a$ мало отличаются от своих асимптотических выражений, справедливых при $kr \gg l$,

$$R_{kl}(r) \simeq A_l \frac{\sin(kr - \frac{\pi}{2}l + \delta_l)}{kr}, \quad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}.$$

По непрерывности волновой функции

$$R_{kl}(r) \Big|_{r=a} = 0 \quad \Rightarrow \quad \sin(ka - \frac{\pi}{2}l + \delta_l) \approx 0,$$

откуда

$$\delta_l \approx -ka + \frac{\pi}{2}l.$$

Для вклада парциальной волны

$$\sin^2 \delta_l = \frac{1}{2} (1 - \cos 2\delta_l) = \frac{1}{2} \{1 - (-1)^l \cos 2ka\}.$$

Поэтому в полном сечении

$$\sigma = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{ka \gg 1} (2l+1) \sin^2 \delta_l$$

можно выделить два вклада: первый дает

$$\frac{2\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{ka \gg 1} (2l+1) = 2\pi a^2,$$

а второй

$$-\frac{2\pi}{k^2} \cos(2ka) \sum_{l=0}^{ka \gg 1} (2l+1)(-1)^l$$

можно легко оценить согласно разбиению на четные и нечетные l :

$$\sum_{l=0}^{ka \gg 1} (2l+1)(-1)^l = \sum_{n=0}^{\frac{1}{2}ka \gg 1} (4n+1) - \sum_{n=0}^{\frac{1}{2}ka \gg 1} (4n+3) \approx n(2n+1) - n(2n+3) \Big|_{n=\frac{1}{2}ka \gg 1},$$

и

$$-\frac{2\pi}{k^2} \cos(2ka) \sum_{l=0}^{ka \gg 1} (2l+1)(-1)^l \approx 2\pi a^2 \frac{\cos(2ka)}{ka}, \quad \left| \frac{\cos(2ka)}{ka} \right| \ll 1,$$

а значит, этот вклад подавлен по сравнению с первым, и им можно пренебречь. В итоге, сечение определяется геометрической величиной

$$\sigma \approx 2\pi a^2.$$

■

Заметим, что исследование зависимости амплитуды рассеяния от энергии составляет предмет специальных исследований, которые мы оставляем вне рамок этих лекций.

13.5. Рассеяние тождественных частиц

При потенциальном рассеянии друг на друге двух тождественных частиц необходимо учесть перестановочную симметрию бозонного или фермионного типа с учетом спиновой волновой функции. Если потенциал, например, в ведущем приближении не зависит от спина, то спин каждой из частиц сохраняется по отдельности и спиновая волновая функция факторизуется.

Разложим спиновую волновую функцию по состояниям с определенными значениями полного спина двух тождественных частиц. При этом важно, что при сложении двух спинов состояние с максимальным значением спина S_{max} является симметричным по перестановке частиц; старший вектор по построению симметричен по перестановке; понижающий оператор $S_- = s_-^a + s_-^b$ также симметричен по перестановке, откуда сразу следует, что и векторы состояния, полученные действием понижающего оператора на старший вектор, имеют симметрию старшего вектора. Старший вектор состояния с полным спином $S = S_{max} - 1$, на единицу меньшим максимального значения полного спина, ортогонален состоянию с максимальным полным спином и проекцией $S_{max} - 1$. Отсюда сразу следует, что старший вектор с $S = S_{max} - 1$ антисимметричен по перестановке частиц, так как из двух независимых векторов состояний с проекцией $S_{max} - 1$ можно построить симметричный и антисимметричный по перестановкам векторы состояний, которые, конечно будут ортогональны, так как скалярное произведение — амплитуда вероятности — не зависит от перестановки тождественных частиц: “до перестановки” равно “после перестановки” $\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} = -\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}$. Но симметричное состояние относится к максимальному спину, значит, антисимметричное — состояние с $S = S_{max} - 1$. Опять же все векторы состояния с этим суммарным спином будут иметь симметрию старшего вектора, т.е. будут антисимметричны. Повторение этой процедуры¹⁸ приводит нас к важному выводу: спиновые состояния с максимальным спином — симметричны по перестановкам, а последующее уменьшение спина на единицу приводит к последовательному чередованию симметричных свойств, т.е. спиновые состояния фермионов с нечетным спином симметричны по перестановкам, а состояния с четным спином — антисимметричны. Поэтому пространственные части волновых функций фермионов с нечетным спином должны быть антисимметричны по перестановкам, а состояния с четным спином — симметричны. Точно также для бозонов: спиновые состояния с четным спином симметричны по перестановкам, а состояния с нечетным спином — антисимметричны, и пространственные части волновых функций с четным спином должны быть симметричны по перестановкам, а с нечетным спином — антисимметричны. В итоге, пространственные волновые функции для пары фермионов и для пары бозонов обладают одинаковыми свойствами по перестановке частиц: пространственные волновые функции с четным спином должны быть симметричны по перестановкам, а с нечетным спином — антисимметричны. Согласно этому для четных и нечетных значений полного спина асимптотическое поведение волновых функций в задаче рассеяния в системе центра масс определяется выражениями

$$\psi^{(+)}(\mathbf{r}) \simeq e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \pm e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} + \frac{e^{ikr}}{r} \{f(\theta) \pm f(\pi - \theta)\}, \quad (13.45)$$

так как перестановка частиц в системе центра масс соответствует замене $\mathbf{r} \mapsto -\mathbf{r}$, а значит, $\theta \mapsto \pi - \theta$. Дифференциальное сечение рассеяния дается выражением

$$d\sigma = |f(\theta) \pm f(\pi - \theta)|^2 d\Omega, \quad (13.46)$$

¹⁸Предлагаем читателям самим провести построение для спиновых состояний с меньшим значением спина.

потому что падающий поток остается прежним. Важно подчеркнуть, что для тождественных частиц в сечении возникает интерференция за счет обменного взаимодействия.

13.6. О кулоновском потенциале, резонансах и неупругих столкновениях

В заключение этой темы сделаем несколько замечаний о важных вопросах, которые мы опустили.

Кулоновские силы. В проведенном нами изложении теории рассеяния мы полагали, что потенциальные силы являются короткодействующими. Тогда установленные асимптотики для волновой функции в задаче рассеяния являются точными, а интегралы, определяющие амплитуду рассеяния, сходятся на верхнем пределе. Например, для фазы рассеяния подынтегральное выражение ведет себя при $r \rightarrow \infty$ как

$$r^2 \Phi_{kl}^{(0)}(r) \Phi_{kl}(r) V(r) \sim r^2 \frac{1}{r^2} \sin(kr - \frac{\pi}{2} l) \sin(kr - \frac{\pi}{2} l + \delta_l) V(r) \sim V(r).$$

Поэтому, так как $|\sin(x)| \leq 1$, интегралы заведомо сходятся на верхнем пределе и фазы оказываются конечными, если потенциал $V(r)$ убывает быстрее, чем $1/r$, т.е. если силы действительно короткодействующие. Отсюда становится ясно, что физически актуальный случай дальнедействующих сил кулоновского типа требует специального рассмотрения. Этого следовало ожидать и из того факта, что дальнедействующие силы искажают свободные волны и на больших расстояниях, так что аппроксимация асимптотических состояний волнами де Бройля в этом случае может оказаться некорректной. В самом деле, уже при классическом рассмотрении можно установить, что частицы одной энергии, падающие из бесконечности на центр кулоновских сил с импульсами, параллельными заданному направлению, с одинаковым удалением по оси импульса и различными прицельными параметрами, на больших, но конечных расстояниях уже образуют фронт, отличный от плоского. Это искажение фронта в кулоновском случае может быть установлено точно, потому что квантовомеханическая задача рассеяния решается до конца в терминах спецфункций. В частности, оказывается, что асимптотическое поведение для рассеянной волны принимает вид

$$R_{kl}(r) \sim \frac{1}{r} \sin \{kr + c(k) \ln(2kr) - \frac{\pi}{2} l + \delta_l\},$$

и аналогично для прошедшей волны с той разницей, что под логарифмом появляется зависящий от угла фактор. Дополнительная логарифмическая фаза искажает фронт падающей волны и модифицирует асимптотическое поведение рассеянной волны, но этими искажениями можно последовательно пренебречь при вычислении потоков вероятности, так как они оказываются подавленными как $1/r$. При этом оказывается, что точное выражение для дифференциального сечения кулоновского рассеяния воспроизводится в борновском приближении: формула Резерфорда.

Резонансы. Парциальное сечение достигает своего максимума $\sigma_l = 4\pi(2l+1)/k^2$ при энергии, когда $\delta_l = \pi/2$. В этом случае говорят о наличии резонанса в l -канале. Запишем парциальную амплитуду

$$\frac{k}{2l+1} f_l = \frac{\sin \delta_l}{e^{-i\delta_l}} = \frac{\sin \delta_l}{\cos \delta_l - i \sin \delta_l} = \frac{1}{\operatorname{ctg} \delta_l - i}.$$

Котангенс парциального сдвига δ_l обращается в нуль, если энергия близка к резонансной $E \approx E_*$, т.е.

$$\operatorname{ctg} \delta_l \approx 2 \frac{E_* - E}{\Gamma}, \quad (13.47)$$

где мы ввели величину размерности энергии Γ и положили, что в ведущем приближении зануление происходит линейно по энергии. Значит,

$$\delta_l \approx \arctan \frac{\Gamma}{2(E_* - E)} \quad (13.48)$$

при вариации энергии вблизи резонанса в малой области размером в несколько Γ пробегает значения от нуля до π . Для парциальной фазы можно записать

$$\frac{k}{2l+1} f_l = \frac{e^{2i\delta_l} - 1}{2i} = \frac{i}{2} - \frac{i}{2} e^{2i\delta_l}. \quad (13.49)$$

Это показывает, что в комплексной плоскости парциальная амплитуда с ростом энергии пробегает против часовой стрелки по окружности, центр которой смещен из нуля на чисто мнимую ось, как это показано на рис. 9.5. Подобный график называют “Арганд-плот”. Окружность на таком графике практически замкнутая, если вдали от резонанса сдвиг фазы относительно мал.

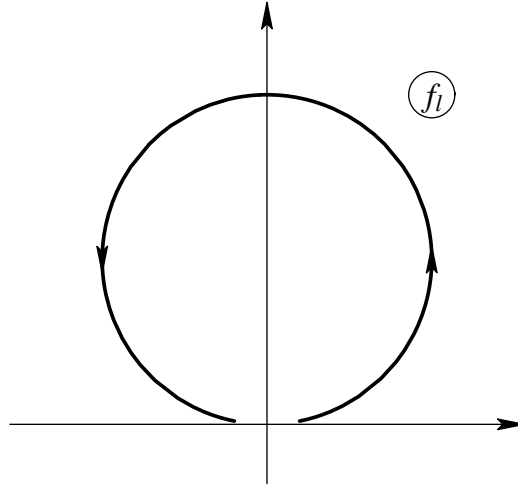


Рис. 9.5: “Арганд-плот” — зависимость комплексной парциальной амплитуды от энергии вблизи резонанса.

Парциальное сечение рассеяния вблизи резонанса как функция энергии приобретает зависимость брейт-вигнеровского типа

$$\sigma_l = \frac{\pi(2l+1)}{k^2(E)} \frac{\Gamma^2}{(E_* - E)^2 + \Gamma^2/4}, \quad (13.50)$$

т.е. имеет вид пика с шириной на полувысоте Γ . Однако пикообразная форма зависимости сечения от энергии сама по себе может возникать по различным динамическим причинам, поэтому для идентификации резонансов при парциально-волновом анализе экспериментальных данных по рассеянию поточечно строят Арганд-плот, что в случае характерной

зависимости и служит достоверным доказательством наличия резонанса в том или ином канале.

Выше мы молчаливо полагали, что ширина Γ положительна. Это отвечает тому, что амплитуда рассеяния

$$\frac{k}{2l+1} f_l \approx \frac{\frac{\Gamma}{2}}{E_* - E - i\frac{\Gamma}{2}}$$

имеет полюс в комплексной плоскости энергии при $E = E_* - i\Gamma/2$, т.е. полюс смещен в нижнюю полуплоскость. Этот вопрос тесно связан с исследованием аналитических свойств как амплитуд рассеяния, так и функции Грина стационарного уравнения Шредингера, что выходит за рамки нашего изложения. Вкратце же отметим, что, в частности, на примере функции Грина свободной частицы мы видели, что по энергии она имеет разрез в комплексной плоскости вдоль вещественной оси от нуля до бесконечности, т.е. при значениях энергии в непрерывном спектре. При наличии связанных состояний функция Грина, как следует из разложения по базису стационарных состояний, приобретает полюса на вещественной оси в точках дискретного спектра. Резонансы имеют место в непрерывном спектре, так что отмеченный полюс расположен “за” разрезом, т.е. на нефизическом листе двулистной функции Грина, зависящей от $k = \sqrt{2mE}/\hbar$.

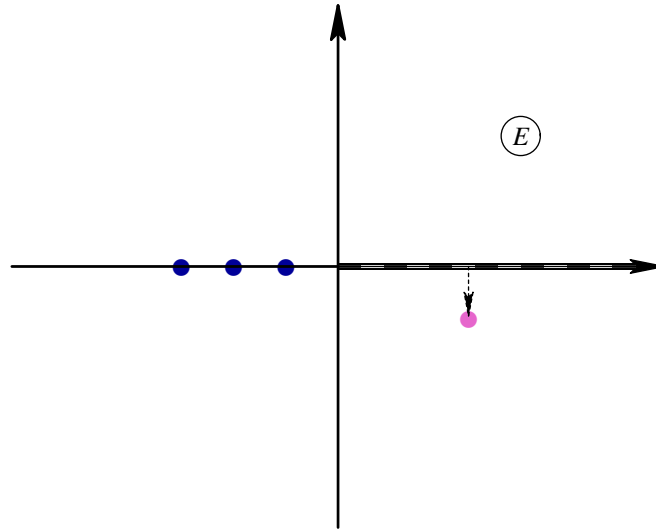


Рис. 9.6: Особенности функции Грина: полюса на вещественной оси, отвечающие связанным состояниям, разрез в непрерывном спектре и полюс резонанса под разрезом на нефизическом листе.

При этом мы показали, что для запаздывающей функции Грина мнимая добавка к энергии в полюсе должна быть отрицательной, что соответствует распаду метастабильного состояния – резонанса. Тогда величина $\tau = \hbar/\Gamma$ определяет время жизни резонанса.

Неупругие столкновения. При изложении фазовой теории рассеяния мы полагали, что поток вероятности сохраняется: число падающих на мишень частиц равно числу рассеянных, так что имеет место тождество

$$|S_l| \equiv 1,$$

и рассеяние происходит упругим образом. Однако, если в процессе столкновения образуются частицы, отличные от исходных, то говорят, что открываются неупругие каналы рассеяния: пространство асимптотических состояний двух частиц становится неполным, часть падающего потока инициирует неупругие процессы, и

$$|S_l| < 1. \quad (13.51)$$

Тогда сечение упругих (elastic) столкновений с $f_l = (2l + 1)(S_l - 1)/(2ik)$

$$\sigma_{\text{el.}} = \frac{\pi}{k^2} \sum_l (2l + 1) |S_l - 1|^2, \quad (13.52)$$

а недостающий поток вероятности в рассеянной волне, пропорциональный $1 - |S_l|^2$, естественно отнести к сечению неупругих (inelastic) столкновений, так что его полное сечение

$$\sigma_{\text{inel.}} = \frac{\pi}{k^2} \sum_l (2l + 1) (1 - |S_l|^2). \quad (13.53)$$

Полное (total) сечение

$$\sigma_{\text{tot.}} = \sigma_{\text{el.}} + \sigma_{\text{inel.}} = \frac{\pi}{k^2} \sum_l (2l + 1) \{|S_l - 1|^2 + 1 - |S_l|^2\}. \quad (13.54)$$

Преобразуем

$$|S_l - 1|^2 + 1 - |S_l|^2 = (S_l - 1)(S_l^* - 1) + 1 - |S_l|^2 = 2 - (S_l + S_l^*) = 2(1 - \Re S_l).$$

В итоге,

$$\sigma_{\text{tot.}} = \frac{2\pi}{k^2} \sum_l (2l + 1) (1 - \Re S_l). \quad (13.55)$$

Заметим, что

$$\Im m f_l = \frac{2l + 1}{2k} \Im m \frac{1}{i} (\Re S_l - 1 + i \Im m S_l) = \frac{2l + 1}{2k} (1 - \Re S_l).$$

Тогда по-прежнему справедлива оптическая теорема

$$\sigma_{\text{tot.}} = \frac{4\pi}{k} \sum_l \Im m f_l, \quad (13.56)$$

что отражает факт сохранения вероятности с учетом вклада неупругих столкновений.

Наконец, отметим, что резонанс при наличии неупругих каналов рассеяния на “Арганд-плоте” проявляется в виде витка неправильной спирали.

Задача 10. Найти сечение рассеяния быстрых частиц на абсолютно черном шаре радиуса a .

Решение. Будем называть абсолютно черным тело, которое поглощает при рассеянии все падающие на него волны, т.е. оно не отражает волны, достигшие его поверхности. Как мы видели, центробежные силы создают потенциальный барьер, который непроницаем для волн с $l \gg ka$. Поэтому для этих волн отражение происходит также, как и в свободном случае: $S_l = 1$. При $l \leq ka$ волны достигают поверхности черного шара, и отражения не происходит: $S_l = 0$, а значит, имеет место неупругое рассеяние ($|S_l| < 1$). В этом случае сечение упругого рассеяния

$$\sigma_{\text{el.}} = \frac{\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{ka} (2l+1) |S_l - 1|^2 = \frac{\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{ka} (2l+1) = \pi a^2,$$

а неупругого

$$\sigma_{\text{inel.}} = \frac{\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{ka} (2l+1) (1 - |S_l|^2) = \frac{\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{ka} (2l+1) = \pi a^2 = \sigma_{\text{el.}}.$$

Итак, упругое и неупругое сечения равны друг другу. Найдём мнимую часть упругого рассеяния вперед

$$\Im f_l(0) = \Im \left[\frac{2l+1}{2ik} (S_l - 1) \right] = \frac{2l+1}{2k}$$

В итоге, для каждого парциального сечения устанавливаем равенство

$$\sigma_l = \sigma_{\text{el.}}^l + \sigma_{\text{inel.}}^l = \frac{4\pi}{k} \Im f_l(0) = \frac{2\pi}{k^2} (2l+1),$$

т.е. соотношение оптической теоремы для заданного типа рассеяния. ■

Послесловие

*“Признаваться в незнании, на мой взгляд, —
одно из лучших и вернейших доказательств
наличия разума.”*

Мишель де Монтень

В этом курсе лекций автор старался начертать теоретические основы квантовой механики в замкнутой форме на умеренно высоком уровне строгости логических конструкций, стремясь сохранить ясность изложения, что неминуемо привело к потере многих, может быть, и важных деталей.

Это становится достаточно очевидным, если упомянуть хотя бы даже те «стандартные вопросы», которые «выпали» из курса: так, феноменология, т.е. приложение теории к актуальным и важным задачам, представлена лишь фрагментарно; опущены подробная теория измерений и обсуждение методически важных и исторически наглядных квантовых парадоксов; не изложен формализм сложения трех и более моментов, нет теории неупругих столкновений и анализа аналитических свойств амплитуды рассеяния. . . И этот список может быть продолжен. Однако автор полагает, что исчерпывающее изложение предмета в одном учебнике является методически ущербным, потому что материал действительно усваивается и становится рабочим инструментом, если у студента возникает о нем собственное мнение, а это практически становится возможно при знакомстве с разными точками зрения на предмет. Поэтому тотальный охват вопросов одним автором создает иллюзию законченности изучения, в то время как пробелы в тематике курса невольно побуждают студента обратиться к другим учебникам и пособиям и при этом не только «вычитать» вопрос из программы, но и пролистать их, а значит, увидеть многое в ином свете и под другим ракурсом, что часто служит катализатором качественного скачка в понимании.

С другой стороны, не нашли отражения в курсе и «новые достижения», такие как неравенства Белла, позволяющие научно строго исключить возможность вероятностного описания природы за счет введения «скрытых параметров» взамен понятия амплитуды состояний и их гильбертова пространства; бурно развивающаяся теория квантовых вычислений и т.п.

Однако нужно иметь в виду специфику университета, студентам которого предлагаются эти лекции, а именно, то, что курс квантовой механики по кафедре теоретической физики составляет лишь один из элементов базисного образования, в котором есть также и общая физика с качественным рассмотрением множества феноменологических задач, и лабораторные занятия, и семинары по решению задач, где упоминаются типовые приложения квантовой механики. Еще важнее, что старшекурсники физтеха продолжают затем свое специализированное, углубленное образование на базовых кафедрах в исследовательских организациях, где формируются конкретные научные интересы студентов и соответственно этому расширяется их кругозор и знания.

Именно в свете этих аргументов и фактов автор и не ставил себе целью создание энциклопедического труда по квантовой механике, что просто было бы ему явно не по силам. В свое оправдание могу привести лишь слова все того же Мишеля де Монтеня: *“Рука, что дает нам истину, — смертная, и смертная же рука принимает ее.”*

Литература

- [1] Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. *“Квантовая механика. Нерелятивистская теория.”* — М.: Наука, 1974.
- [2] Мессиа А. *“Квантовая механика.”* — М.: Наука; Т.1, 1978; Т.2, 1979.
- [3] Шифф Л. *“Квантовая механика.”* — М.: ИЛ, 1967.
- [4] Фок В.А. *“Начала квантовой механики.”* — М.: Наука, 1976.
- [5] Дирак П.А.М. *“Принципы квантовой механики.”* — М.: Наука, 1979.
- [6] Блохинцев Д.И. *“Основы квантовой механики.”* — М.: Наука, 1976.
- [7] Давыдов А.С. *“Квантовая механика.”* — М.: Наука, 1973.
- [8] Зелевинский В.Г. *“Лекции по квантовой механике.”* — Новосибирск: Сибирское университетское издательство, 2002.
- [9] Елютин П.В., Кривченков В.Д. *“Квантовая механика.”* — М.: Наука, 1976.
- [10] Галицкий В.М., Карнаков Б.М., Коган В.И. *“Задачи по квантовой механике.”* — М.: Наука, 1981.
- [11] Балашов В.В., Долинов В.К. *“Курс квантовой механики.”* — Москва–Ижевск: РХД, 2001.
- [12] Барабанов А.Л. *“Лекции по квантовой механике.”* Учебное пособие в 2-х частях. — М.: МФТИ, 2005. Интернет ресурс – <http://theorphys.mipt.ru/biblio/qm-barabanov.html>.
- [13] Аллилуев С.П. *“Квантовая теория сложного атома и квантовая теория излучения.”* Учебное пособие. — М.: МФТИ, 1984.
- [14] Белоусов Ю.М. *“Избранные главы квантовой механики.”* Учебное пособие. — М.: МФТИ, 1996.
- [15] Белоусов Ю.М., Кузнецов В.П., Смилга В.П. *“Катехизис.”* Учебное пособие. — М.: МФТИ, 2005.
- [16] Ирошников Г.С. *“Континуальный интеграл и когерентные состояния в квантовой механике и теории поля.”* Учебное пособие. — М.: МФТИ, 1997.
- [17] Тернов А.И. *“Основы релятивистской квантовой механики.”* Учебное пособие. — М.: МФТИ, 2002.
- [18] Вереглес С.Н., *“Лекции по квантовой электродинамике.”* — М.: ФИЗМАТЛИТ, 2005.
- [19] Вайнберг С., *“Квантовая теория поля.”* — М.: ФИЗМАТЛИТ, Т.1, 2003.